

Министерство образования и науки Российской Федерации

УДК 551.322, 536.421
ГРНТИ 30.17, 30.17.35, 30.51.31
Инв. №

УТВЕРЖДЕНО:
Исполнитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»
От имени Руководителя организации _____/Иванов А.О./ М.П.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ОТЧЕТ

о выполнении 5 этапа Государственного контракта
№ 16.740.11.0356 от 07 октября 2010 г.

Исполнитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»
Программа (мероприятие): Федеральная целевая программа «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг., в рамках реализации мероприятия № 1.3.1 Проведение научных исследований молодыми учеными - кандидатами наук.
Проект: Нелинейный тепломассоперенос структурно-фазовых переходов и его влияние на прирост льда, его отражательную способность и теплообмен между океаном и атмосферой
Руководитель проекта: _____/Низовцева Ирина Геннадьевна (подпись)

Екатеринбург
2012 г.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ИСПОЛНИТЕЛЕЙ
по Государственному контракту 16.740.11.0356 от 07 октября 2010 на выполнение
поисковых научно-исследовательских работ для государственных нужд

Организация-Исполнитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

Руководитель темы:

кандидат физико-математических наук, без ученого звания	_____	Низовцева И. Г.
	подпись, дата	

Исполнители темы:

кандидат физико-математических наук, доцент	_____	Малыгин А. П.
	подпись, дата	

кандидат физико-математических наук, без ученого звания	_____	Иванов А. А.
	подпись, дата	

кандидат физико-математических наук, без ученого звания	_____	Крутикова Е. В.
	подпись, дата	

Реферат

Количество страниц отчета: 64

Количество частей отчета: 5

Количество иллюстраций: 3

Количество таблиц: 1

Количество используемых источников: 60

Количество приложений: 1

Ключевые слова: гидромеханика, тепломассоперенос, фазовые переходы, двухфазная зона, кристаллизация, турбулентность, подвижные границы, структурообразование.

В отчете представлены результаты исследований, выполненных по 5 этапу Государственного контракта № 16.740.11.0356 "Нелинейный тепломассоперенос структурно-фазовых переходов и его влияние на прирост льда, его отражательную способность и теплообмен между океаном и атмосферой" (шифр "2010-1.3.1-151-023") от 07 октября 2010 по направлению "Проведение научных исследований молодыми учеными - кандидатами наук по следующим областям:- геология; горное дело;- геохимия;- геофизика;- география и гидрология суши;- океанология;- физика атмосферы" в рамках мероприятия 1.3.1 "Проведение научных исследований молодыми учеными - кандидатами наук.", мероприятия 1.3 "Проведение научных исследований молодыми учеными - кандидатами наук и целевыми аспирантами в научно-образовательных центрах", направления 1 "Стимулирование закрепления молодежи в сфере науки, образования и высоких технологий." федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы.

Цель работы: Решение фундаментальной проблемы теории кристаллизации льда с протяженной областью структурно-фазового перехода, изучение влияния процессов тепломассопереноса в переохлажденной метастабильной области фазовых превращений на картину теплообмена между океаном и атмосферой

Методы, использованные при выполнении отдельных видов работ: Использованные теории и модели (процессов тепломассопереноса, теплового излучения, двухфазной зоны, гидромеханики, турбулентности, фильтрации, авторский задел по тематике исследований) являются фундаментальной базой исследований по проекту, корректным образом описывают рассматриваемые процессы и явления. Указанные теории позволили получить наиболее точное решение поставленных задач с наименьшей погрешностью относительно наблюдаемых зависимостей на всех этапах исследования, что повышает качество выполнения поисковых научно-исследовательских работ на данном этапе (без их анализа было бы невозможно сформулировать соответствующие математические постановки задач для рассматриваемых процессов на самом высоком научном уровне).

Инструментарий, использованный при выполнении отдельных видов работ: Компьютеры, оснащенные математическими пакетами “Mathcad 14”, “Maple 9” уровня не ниже Intel Pentium IV. Лицензионное программное обеспечение

Результаты, полученные при выполнении отдельных видов работ: Сформированы материалы теоретических исследований, раскрывающие содержание работ по решению поставленной научно-исследовательской задачи, в том числе: подготовлен отчет о НИР V этапа, содержащий результаты теоретических исследований V этапа, изложение методик проведения исследований, описание полученных результатов, а также обобщение результатов исследований I-V этапов; презентация результатов поисковой научно-исследовательской работы в формате Microsoft PowerPoint.

СОДЕРЖАНИЕ

«Проведение 5 этапа исследований по проблеме: Нелинейный тепломассоперенос структурно-фазовых переходов и его влияние на прирост льда, его отражательную способность и теплообмен между океаном и атмосферой»

Введение	6
1. Теоретические исследования V этапа: разработка и решение модели и определение теплового потока кристаллизации льда с учетом нуклеации и кинетики роста частиц твердой фазы в переохлажденной метастабильной области фазового превращения.....	9
1.1. Модель направленной кристаллизации трехкомпонентных систем.	9
1.2. Точные аналитические решения нелинейной модели.....	14
2. Подготовка публикации результатов исследований.	24
3. Обобщение и оценка результатов исследований; анализ моделей, методов, программ и алгоритмов, позволяющих увеличить объем знаний для более глубокого понимания изучаемого предмета исследования.	25
4. Разработка рекомендаций по использованию результатов НИР для научно-образовательных курсов.	28
5. Подготовка итогового научно-технического отчета	29
Заключение.....	30
Список использованных источников	35
Приложение 1. Копии экспертных заключений и статей, опубликованных по результатам исследований.....	42

Введение

Хорошо известно, что наличие примеси кардинальным образом изменяет различные характеристики процесса кристаллизации расплавов и растворов [1-3]. Одним из наиболее значимых эффектов, возникающих в процессах затвердевания является концентрационное переохлаждение, впервые обнаруженное в работе [4] (механизм возникновения данного типа переохлаждения и его особенности по сравнению с термическим переохлаждением подробно описаны в работе [5]). Проведенное в работах [6, 7] численное моделирование затвердевания от охлаждаемой стенки и развитая в работах [8, 9] приближенная теория этого процесса показали, что концентрационное переохлаждение возникает достаточно быстро после начала процесса кристаллизации (времена его возникновения составляют порядка нескольких минут). После того, как перед границей фазового перехода твердая фаза – расплав образовалась переохлажденная область, процесс затвердевания нельзя больше описывать в рамках классической термодиффузионной задачи Стефана с плоским фронтом [10]. Реакцией системы на образование концентрационного переохлаждения является формирование условий преимущественного роста отдельных выступов твердой фазы в глубь переохлажденного расплава. Другими словами, плоская фронтальная граница фазового перехода становится морфологически неустойчивой. Линейный анализ такой неустойчивости для кристаллизации плоского фронта с постоянной скоростью впервые был проведен в классических работах [11-13], а в работе [14] было дано его обобщение на случай локально-неравновесного затвердевания. Этот анализ показал, что в процессе кристаллизации существует область параметров, в которой неустойчивость может приводить к возникновению сложных структур примесного распределения. Для расчета параметров таких структур была разработана нелинейная теория устойчивости плоской границы раздела фаз [15] (в работе [16] эта теория была применена для нелинейного анализа устойчивости поверхности разрыва, моделирующей область фазового перехода). Ростовые структуры твердой фазы в области фазового превращения, пространство между которыми заполнено переохлажденной жидкостью, образуют двухфазную область,

которая располагается между чисто твердой и жидкой фазами системы. Процесс затвердевания при наличии такой области становится намного сложнее, чем фронтальный процесс. Так, например, в области фазового перехода может происходить как рост дендритных структур [17, 18], так и гомогенная нуклеация частиц твердой фазы на растворенных примесях [19-21]. Далее, в работах [22-29] были исследованы условия образования такой области перед плоским фронтом для нестационарной кристаллизации в автомодельных условиях. Интересным обстоятельством является то, что при изменении теплофизических параметров процесса неустойчивость может изменять свой тип [30] (переключаться с мягкого типа на жесткий).

Математическая модель процесса затвердевания бинарных соединений с двухфазной зоной, впервые была обобщена в работах [31, 32]. Она представляет собой нелинейную нестационарную систему уравнений в двухфазной зоне, твердой и жидкой фазах, которые связаны пограничными условиями на движущихся межфазных границах твердая фаза – двухфазная область и двухфазная область – жидкая фаза. Общих методов решения таких сложных задач с подвижными границами не существует и дальнейшее развитие теории было связано с разработкой приближенных методов решения таких задач. Существенное упрощение может быть достигнуто при рассмотрении процессов интенсивного роста твердой фазы в двухфазной зоне, когда выделяющаяся скрытая теплота кристаллизации компенсирует концентрационное переохлаждение. В случае затвердевания бинарных систем, в работах [33-38] были разработаны методы получения точных аналитических решений нелинейных уравнений тепломассопереноса для процессов кристаллизации с постоянной скоростью, которые основаны на переходе к новой независимой переменной – доле твердой фазы в области фазового перехода (в этих работах теория была также обобщена на присутствие слабой конвекции, эффектов термодиффузии и температурной зависимости коэффициента диффузии). Далее, в работах [27-29] были разработаны методы решения уравнений двухфазной зоны при кристаллизации бинарных

расплавов в автомодельных условиях, которые основаны на разложении температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы в степенные ряды. Эта теория была обобщена в работах [39-44] на решение уравнений двухфазной зоны в сильно нестационарных условиях реализации процесса (здесь были использованы уравнение Шейла [45, 46] и некоторые дополнительные оценки параметров системы).

Довольно часто необходимо учитывать присутствие в системе третьего компонента. Основные уравнения безконвективной кристаллизации в такой системе на основе данных эксперимента [47] были развиты в работе [48]. В силу сильной нелинейности системы в [48] были получены ее аналитические решения лишь в случае отсутствия диффузии и при нулевой скрытой теплоте затвердевания. Далее в работах [49, 50] была разработана приближенная теория решения нелинейных уравнений работы [48] в автомодельных условиях в отсутствие диффузии и при линейных уравнениях ликвидуса и котектики, а в работах [51-53] были развиты методы учета диффузии [51, 52] и отклонений упомянутых зависимостей от линейных [53]. В целом, теория работ [49-53] хорошо описывает экспериментальные данные в автомодельных условиях реализации процесса. На данном этапе работы, являющейся продолжением и развитием научных исследований по данной тематике, предложен оригинальный метод решения математической модели работы [48], описывающей затвердевание трехкомпонентных систем в стационарных условиях, когда скорость кристаллизации, распределения температуры, концентраций примеси и долей твердых фаз в системе устанавливаются и перестают зависеть от времени.

1. Теоретические исследования V этапа: разработка и решение модели и определение теплового потока кристаллизации льда с учетом нуклеации и кинетики роста частиц твердой фазы в переохлажденной метастабильной области фазового превращения.

1.1. Модель направленной кристаллизации трехкомпонентных систем.

Рассмотрим процесс направленного затвердевания трехкомпонентной системы вдоль пространственной оси z (рис. 1).

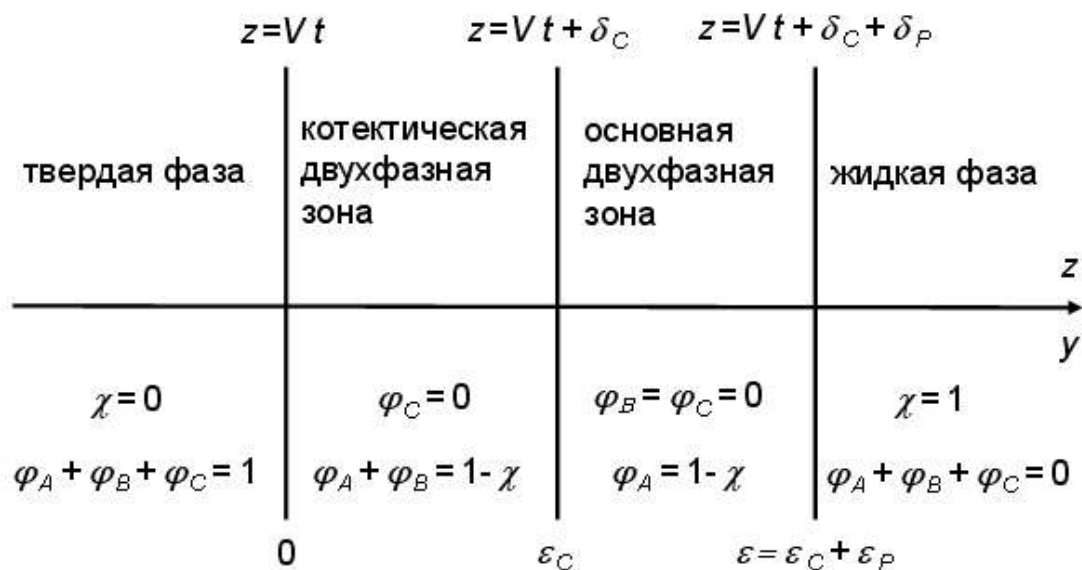


Рис. 1. Схема процесса направленной кристаллизации трехкомпонентных систем с двумя областями фазового перехода.

Через B и C обозначим концентрации двух веществ, растворенных в растворителе A ($A+B+C=1$). Поскольку основное вещество претерпевает фазовый переход в области, не совпадающей с областью фазового перехода второго вещества, в процессе затвердевания возникает две двухфазных зоны — основная и котектическая. Обозначим их протяженности через δ_P и δ_C . Учитывая, что фазовая диаграмма рассматриваемой системы подробно обсуждалась в работах [48, 49], не будем здесь останавливаться на уравнениях ликвидуса, котектики и эвтектики, отсылая читателя к этим исследованиям. Важным обстоятельством является то, что время релаксации температурного поля $\tau_T \sim l^2/\kappa$ намного меньше характерных

времен релаксации концентрационных полей $\tau_B \sim l^2/D_B$ и $\tau_C \sim l^2/D_C$, т.е. $\tau_T \ll \tau_C$ и $\tau_T \ll \tau_B$ (здесь l - характерный масштаб длины, κ - коэффициент температуропроводности, D_B и D_C - коэффициенты диффузии примеси компонент B и C). Из этой оценки времен релаксации следует, что производные от температуры по времени t много меньше остальных слагаемых соответствующих уравнений модели. Учитывая это обстоятельство, запишем математическую модель процесса на основе результатов работы [48].

В жидкой фазе системы (растворе) концентрации примесей B_∞ и C_∞ , а также температурный градиент G_L являются заданными величинами

$$B \rightarrow B_\infty, C \rightarrow C_\infty, z \rightarrow \infty, \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = G_L, \quad z > Vt + \delta = Vt + \delta_C + \delta_P, \quad (2)$$

где T - температура, V - постоянная скорость затвердевания. Кроме этого, в жидкой фазе выполняются уравнения диффузии примеси

$$\frac{\partial B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 B}{\partial z^2}, \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D_C \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad z > Vt + \delta. \quad (3)$$

Пограничные условия на межфазной границе основная двухфазная зона – расплав, имеющие физический смысл баланса тепла, массы и условий непрерывности, записываются в виде

$$L_v V \phi_A^- = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]^+, T^- = B^- = C^- = 0, z = Vt + \delta, \quad (4)$$

$$BV \phi_A^- = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]^+, CV \phi_A^- = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]^+, z = Vt + \delta, \quad (5)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^+ = m_B \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ + m_C \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)^+, z = Vt + \delta. \quad (6)$$

Здесь L_v - скрытая теплота затвердевания, $\bar{k} = k_L \chi + k_S (1 - \chi)$, k_L и k_S - коэффициенты теплопроводности расплава и твердой фазы, χ - доля жидкой фазы, m_B и m_C - наклоны ликвидуса компонент B и C , ϕ_A - доля твердой фазы компонента A . Символами $[\]^+$ и $[\]^-$ соответственно обозначены: скачок величины на границе и ее значение справа от границы. Отметим, что уравнение (6) имеет смысл условия маргинального равновесия [48].

В основной двухфазной зоне, где фазовый переход претерпевает компонент A ($\chi = 1 - \phi_A$), уравнения тепломассопереноса записываются в виде

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{dT}{dz} \right) + L_v \frac{\partial \phi_A}{\partial t} = 0, T \equiv T^L, C^- = T_M + m_B B + m_C C, Vt + \delta_C < z < Vt + \delta, \quad (7)$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \chi B = 0, \quad D_C \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \chi C = 0, \quad Vt + \delta_c < z < Vt + \delta. \quad (8)$$

Здесь T_M обозначает температуру фазового перехода чистого вещества.

Запишем теперь граничные условия на второй межфазной поверхности между котектической и основной двухфазными зонами. Эти условия, отражающие баланс тепла и массы, непрерывность температурного поля и полей концентраций примеси, записываются в виде [48]

$$L_V V \phi_A + \phi_B = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]^+, \quad T = B = C = 0, \quad m_B^C \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ = m_C^C \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)^+ \quad z = Vt + \delta_c, \quad (9)$$

$$V B \phi_A + (B-1) \phi_B = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]^+, \quad VC \phi_A + \phi_B = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]^+, \quad z = Vt + \delta_c. \quad (10)$$

Здесь ϕ_B обозначает долю твердой фазы компонента B , а m_B^C и m_C^C - котектические наклоны ликвидуса компонент B и C .

Далее, уравнения тепломассопереноса в котектической двухфазной зоне, где фазовый переход претерпевают два компонента A и B

($\chi = 1 - \phi_A - \phi_B$), записываются как

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + L_V \frac{\partial \phi_A + \phi_B}{\partial t} = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_c, \quad (11)$$

$$B \equiv B^C \quad \bar{B} = B_E - \frac{T - T_E}{m_B^C}, \quad C \equiv C^C \quad \bar{C} = -\frac{T - T_E^{AB}}{m_C^C}, \quad Vt < z < Vt + \delta_C, \quad (12)$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \chi B + \varphi_B \bar{B} = 0, \quad D_C \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \chi C \bar{C} = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_C. \quad (13)$$

Здесь T_E , B_E и C_E - известные значения температуры и концентраций примеси в точке эвтектики трехкомпонентной системы, а T_E^{AB} - температура в точке эвтектики бинарной системы (см., например, работы [48, 49]).

Граничные условия на поверхности между твердой фазой и котектической зоной имеют следующий вид:

$$L_V V \phi_A + \varphi_B + \varphi_C \bar{C} = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]^+, \quad T = T_E, \quad B = B_E, \quad C = C_E, \quad z = Vt, \quad (14)$$

$$V B \phi_A \bar{C} + \phi_B \bar{C} + B \phi_C \bar{C} = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]^+, \quad z = Vt, \quad (15)$$

$$V C \phi_A \bar{C} + C \phi_B \bar{C} + \phi_C \bar{C} = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]^+, \quad z = Vt. \quad (16)$$

В твердой фазе имеем постоянный температурный градиент G_s , т.е.

$$\frac{\partial T}{\partial z} = G_s, \quad z < Vt. \quad (17)$$

Система уравнений (1)-(17) представляет собой замкнутую систему уравнений и граничных условий для отыскания решения задачи о кристаллизации трехкомпонентной системы с постоянной скоростью.

1.2. Точные аналитические решения нелинейной модели.

Перейдем в движущуюся с постоянной скоростью V систему координат и введем безразмерные переменные и параметры

$$y = \frac{Vz - Vt}{D_B}, \quad \varepsilon_P = \frac{V\delta_P}{D_B}, \quad \varepsilon_C = \frac{V\delta_C}{D_B}, \quad \varepsilon = \frac{V\delta}{D_B}, \quad (18)$$

$$D_{BC} = \frac{D_B}{D_C}, \quad \theta = \frac{T}{m_B B_\infty}, \quad m_{CB} = \frac{m_C}{m_B}, \quad m_{CB}^C = \frac{m_C^C}{m_B^C}.$$

В новой системе координат процесс кристаллизации является установившимся и все неизвестные функции не зависят от времени.

Уравнения диффузии (3) в переменных (18) при использовании граничных условий (1) имеют следующие интегралы:

$$B \Phi = B_\infty + B_1 \exp \left[-y \right], \quad C \Phi = C_\infty + C_1 \exp \left[-D_{BC} y \right], \quad y > \varepsilon = \varepsilon_C + \varepsilon_P, \quad (19)$$

где B_1 и C_1 - постоянные интегрирования. Далее, интегрируя уравнения тепломассопереноса (7) и (8) в основной двухфазной области, находим производные температуры и концентраций примеси

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B \frac{1}{V} V \varphi_A + A_1}{m_B V B_\infty \bar{k}_P \varphi_A}, \quad \bar{k}_P \varphi_A = k_L \frac{1}{V} \varphi_A + k_S \varphi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (20)$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_2 - BV \frac{1}{V} \varphi_A}{V \frac{1}{V} \varphi_A}, \quad \frac{dC}{dy} = \frac{D_{BC} \frac{1}{V} \varphi_A - CV \frac{1}{V} \varphi_A}{V \frac{1}{V} \varphi_A}, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (21)$$

где $A_1 = \bar{k}_P \varphi_{APL} \bar{G}_{PL} - V L_V \varphi_{APL}$, A_2 и A_3 - постоянные интегрирования, G_{PL} и φ_{APL} - градиент температуры и доля твердой фазы при $y = \varepsilon$, определенные со стороны основной двухфазной зоны. В дальнейшем, эти неизвестные будут найдены. Комбинируя теперь выражения (20) и (21) с уравнением ликвидуса (7), находим связь между концентрациями B и C в основной двухфазной области

$$B \varphi_A = g \varphi_A - D_{BC} m_{CB} C \varphi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (22)$$

$$g \varphi_A = \frac{A_2}{V \frac{1}{V} \varphi_A} + \frac{D_{BC} m_{CB} A_3}{V \frac{1}{V} \varphi_A} - \frac{D_B \frac{1}{V} V \varphi_A + A_1}{m_B V \bar{k}_P \varphi_A}.$$

Теперь из уравнений (21) и (22) определяем долю твердой фазы в основной двухфазной зоне в виде обратной зависимости

$$y \Phi_A = \varepsilon_C + \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_A} S \Phi_A d\Phi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (23)$$

$$S \Phi_A = \frac{g' \Phi_A}{g_1 \Phi_A}, \quad g_1 \Phi_A = \frac{D_B}{m_B V k_P \Phi_A} [V \Phi_A - \Phi_{APL} + k \Phi_{APL} \bar{G}_{PL}].$$

Здесь φ_{ACP}^+ обозначает долю твердой фазы справа от границы котектической – основная двухфазные зоны. Далее, из выражения (23) определяем протяженности основной двухфазной зоны ε_P и всей области фазового перехода ε

$$\varepsilon_P = \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} S \Phi_A d\Phi_A, \quad \varepsilon = \varepsilon_C + \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} S \Phi_A d\Phi_A. \quad (24)$$

Ради простоты изложения, рассмотрим далее случай $D_{BC}=1$ [48]. Подставляя (23) в (21), находим концентрацию примеси компонента C в основной зоне фазового превращения

$$C \Phi_A = \left[A_4 + A_3 \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_A} \frac{S \Phi_A \exp \left(\frac{\Phi_A - y \Phi_A}{1 - \Phi_A} \right) d\Phi_A}{V (1 - \Phi_A)} \right], \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon. \quad (25)$$

Соотношения (22)-(25) представляют собой параметрическое решение задачи в основной двухфазной зоне. При этом, параметром является доля твердой фазы φ_A (или $\chi=1-\varphi_A$) затвердевающего в этой области компонента.

Подставляя решения (22)-(25) в граничные условия (4)-(6), получаем следующие выражения, определяющие неизвестные постоянные:

$$\frac{G_L D_B \exp \left(\frac{\Phi_A}{V} \right)}{V m_B} + B_1 + m_{CB} C_1 = 0, \quad (26)$$

$$G_{PL} = \frac{k_L G_L + L_V V \varphi_{APL}}{k_P \varphi_{APL}}, \quad A_2 = V B_\infty, \quad A_3 = V C_\infty, \quad (27)$$

$$B_1 = g \varphi_{APL} B_\infty - m_{CB} C_\infty \exp \left(\frac{\Phi_A}{V} \right) - m_{CB} C_1, \quad (28)$$

$$A_4 = \Phi_\infty + C_1 \exp \left(\frac{\Phi_A}{V} \right) \exp \left(\frac{\Phi_A}{V} - \varepsilon_C \right) - V C_\infty I_0, \quad I_0 = \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_{APL}} \frac{S \Phi_A \exp \left(\frac{\Phi_A}{V} \right) \exp \left(\frac{\Phi_A}{V} - \varepsilon_C \right)}{V (1 - \Phi_A)} d\Phi_A. \quad (29)$$

Из соотношений (26)-(28) можно выразить долю твердой фазы компонента А слева от границы основная двухфазная область – расплав. Опуская подробности математических преобразований, приведем это выражение к виду

$$\varphi_{APL} \left[\frac{m_B V B_\infty + m_{CB} C_\infty}{1 - \varphi_{APL}} - \frac{D_B \left(\frac{L_V}{V} - G_L \right) \left(\frac{1}{k_S} - \frac{1}{k_L} \right)}{k_L + \frac{1}{k_S} - \frac{1}{k_L} \varphi_{APL}} \right] = 0 \quad (30)$$

Интегрирование уравнений (11)-(13) в котектической области фазового перехода дает следующие выражения:

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B (1-V) (1-\chi) + A_5}{m_B V B_\infty k_C \chi}, \quad \bar{k}_C \chi = k_L \chi + k_S (1-\chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (31)$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_6 - V \chi B + \varphi_B}{V \chi}, \quad \frac{dC}{dy} = \frac{A_7 - V \chi C}{V \chi}, \quad 0 < y < \varepsilon_C. \quad (32)$$

В формулах (31) и (32) $A_5 = \bar{k}_C \chi_{SC}^+ G_{SC} - L_V V (1-\chi_{SC}^+)$, $\chi = 1 - \varphi_A - \varphi_B$, A_6 и A_7 - постоянные интегрирования, G_{SC} и χ_{SC}^+ - температурный градиент и доля жидкой фазы справа от границы твердый материал – зона котектики. Эти константы будут определены ниже.

Далее, комбинируя выражения (12), (31) и (32), получаем распределения температуры, концентраций примеси и долей твердой фазы обеих компонент в зоне котектики

$$\theta \chi = \frac{T_E^{AB} - m_C^C C \chi}{m_B B_\infty}, \quad C \chi = \frac{1}{V \chi} \left(A_7 + \frac{F_0 \chi}{m_C^C} \right), \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (33)$$

$$B \chi = m_{CB}^C C \chi + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}, \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (34)$$

$$\varphi_A \chi = 1 - \chi - \varphi_B \chi, \quad \varphi_B \chi = \frac{F_0 \chi}{m_B^C V} + \frac{A_6}{V} - \chi B \chi, \quad 0 < y < \varepsilon_C. \quad (35)$$

Здесь m_{CB}^C определено в выражении (18), а

$$F_0 \chi = \frac{D_B \chi \bar{k}_C \chi_{SC}^+ \bar{G}_{SC} + L_V V \chi_{SC}^+ - \chi}{\bar{k}_C \chi}.$$

Далее, учитывая, что

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{d\theta}{d\chi} \frac{d\chi}{dy},$$

Находим распределение доли твердой фазы в зоне котектики в виде обратной функции и безразмерную протяженность котектической области

$$y \chi = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0 \chi_1} d\chi_1, \quad \varepsilon_C = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi_{CP}^-} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0 \chi_1} d\chi_1, \quad (36)$$

где χ_{CP}^- доля жидкой фазы слева от границы между котектической и основной двухфазными зонами. Выражения (33)-(36) определяют решение задачи в котектической области фазового перехода. Эти решения имеют параметрический вид, как и решения (22)-(25) в основной двухфазной зоне. Однако, параметром здесь является доля жидкой фазы χ .

Подставляя теперь эти решения в граничные условия (14)-(16) и учитывая температурный градиент (17), получаем следующие соотношения для неизвестных постоянных:

$$G_{SC} = \frac{k_S G_S - L_V V \chi_{SC}^+}{\bar{k}_C \chi_{SC}^+}, \quad V \phi_{BSC}^- - \phi_{BSC}^+ - B_E \chi_{SC}^+ + V B_E \chi_{SC}^+ + \phi_{BSC}^+ = A_6, \quad (37)$$

$$V \phi_{CSC}^- - \phi_{CSC}^+ - C_E \chi_{SC}^+ + V C_E \chi_{SC}^+ = A_7, \quad A_7 = V C_E \chi_{SC}^+ - \frac{D_B \chi_{SC}^+}{m_C^C} G_{SC}, \quad (38)$$

где ϕ_{BSC}^- и ϕ_{BSC}^+ - значения доли твердой фазы компонента B слева и справа от границы твердая фаза – котектическая зона, а ϕ_{CSC}^- и ϕ_{CSC}^+ - аналогичные значения для компонента C .

Подстановка производных температуры из выражений (20) и (31) в первое граничное условие (9) определяет явную зависимость скорости затвердевания от температурных градиентов в твердой и жидкой фазах

$$V = \frac{k_S G_S - k_L G_L}{L_V}. \quad (39)$$

Важным обстоятельством является то, что выражение (39) совпадает со скоростью затвердевания плоского фронта и двухфазной зоны, описывающих кристаллизацию бинарных смесей.

Подставляя теперь производные концентраций примеси из выражений (21) и (32) в граничные условия (10), находим постоянные A_6 и A_7

$$A_6 = V B_\infty, \quad A_7 = V C_\infty. \quad (40)$$

Комбинируя сейчас выражения (37), (38) и (40), получаем квадратное уравнение для отыскания доли жидкой фазы справа от границы твердая фаза – область котектики. Его решение записывается в виде

$$\chi_{SC}^+ = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_2a_0}}{2a_2}, \quad (41)$$

$$a_0 = -Vk_S C_\infty, \quad a_1 = VC_E k_S - V \bar{k}_L - k_S \bar{C}_\infty - \frac{D_B k_S G_S}{m_C^C}, \quad a_2 = \frac{D_B L_V V}{m_C^C} + VC_E \bar{k}_L - k_S \bar{C}_\infty.$$

Выражение (41) имеет только одно решение, лежащее на единичном отрезке.

Граничные условия (10) позволяют теперь найти пограничные значения концентраций примеси B_{CP} и $C_{CP} = A_4$ на межфазной поверхности между котектической и основной областями фазового перехода

$$B_{CP} = m_{CB}^C C_{CP} + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C} = g \bar{\phi}_{ACP}^+ - m_{CB}^C C_{CP}, \quad (42)$$

$$C_{CP} = A_4 = \frac{1}{V \chi_{CP}^-} \left(VC_\infty + \frac{D_B \chi_{CP}^- \bar{k}_C \chi_{SC}^+ \bar{G}_{SC} + L_V V \bar{\phi}_{SC}^+ - \chi_{CP}^-}{m_C^C \bar{k}_C \chi_{CP}^-} \right). \quad (43)$$

Подстановка B_{CP} из (42) во второе граничное условие (9) определяет явное выражение для доли твердой фазы справа от границы между двухфазными зонами

$$\varphi_{ACP}^+ = 1 - \frac{B_\infty - m_{CB}^C C_\infty}{B_*}, \quad B_* = B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}. \quad (44)$$

Соотношение (44) показывает, что φ_{ACP}^+ определяется лишь исходными значениями концентраций примеси B_∞ и C_∞ , а также фазовой диаграммой трехкомпонентной системы.

Используя найденные зависимости можно записать решение уравнения (30) в виде

$$\varphi_{APL}^- = 0 \text{ или } \varphi_{APL}^- = \frac{H(G_S - G_L - B_\infty + m_{CB}^C C_\infty)(k_L - k_S)}{H(G_S - G_L + B_\infty + m_{CB}^C C_\infty)(k_S - k_L)}, \quad H = \frac{D_B k_S}{m_B V}.$$

Поскольку второй корень не принадлежит единичному отрезку, в качестве решения необходимо принимать первый корень $\varphi_{APL}^- = 0$.

Далее, комбинируя выражения (42) и (43) находим долю жидкой фазы слева от границы между котектической и основной двухфазными зонами

$$\chi_{CP}^- = \frac{-b_1 \pm \sqrt{b_1^2 - 4b_2 b_0}}{2b_2}, \quad b_0 = -\frac{m_C^C C_\infty}{D_B}, \quad (45)$$

$$b_1 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+ - B_*)}{m_{CB}^C + m_{CB}} \frac{m_C^C}{D_B} - \frac{m_C^C (k_L/k_S - 1) C_\infty}{D_B} - \frac{G_S}{V}, \quad b_2 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+ - B_*)}{m_{CB}^C + m_{CB}} \frac{m_C^C (k_L/k_S - 1)}{D_B} + \frac{L_V}{k_S}.$$

Учитывая, что выражение (45) полностью определяет константу A_4 из соотношения (43), выражение (29) теперь можно использовать для нахождения константы C_1 .

Из соотношений (37) и (38) определяем теперь доли твердой фазы двух компонент слева от границы твердая фаза – зона котектики

$$\varphi_{BSC}^- = B_\infty, \quad \varphi_{CSC}^- = C_\infty. \quad (46)$$

Граничные значения справа от этой поверхности находятся из распределений (35) в виде $\varphi_{ASC}^+ = \varphi_A \chi_{SC}^+$ и $\varphi_{BSC}^+ = \varphi_B \chi_{SC}^+$. Кроме этого, распределения (35) определяют также пограничные значения долей твердой фазы φ_{ACP}^- и φ_{BCP}^- компонент A и B слева от границы между котектической и основной двухфазными зонами как $\varphi_{ACP}^- = \varphi_A \chi_{CP}^-$ и $\varphi_{BCP}^- = \varphi_B \chi_{CP}^-$.

Таким образом, в соответствии с требованиями Государственного контракта, на данном V этапе теоретических исследований, проведены работы по разработке и решению модели и определение теплового потока кристаллизации льда с учетом нуклеации и кинетики роста частиц твердой фазы в переохлажденной метастабильной области фазового превращения.

2. Подготовка публикации результатов исследований.

В рамках выполнения работ по Этапу 5 Государственного контракта № 161.740.11.0356 от «7» октября 2010г. «Нелинейный тепломассоперенос структурно-фазовых переходов и его влияние на приrost льда, его отражательную способность и теплообмен между океаном и атмосферой», исследователи-исполнители НИР подготовили к публикации статьи в высокорейтинговые российские журналы, а именно:

- 1) Malygin A.P., Alexandrov D.V., Analytical description of the quasi-stationary solidification of ternary systems, Russian Metallurgy (Metally), 2012, N 2, P. 136-145.
- 2) Александров Д.В., Иванов А.О., Малыгин А.П., Александрова И.В., Нустров В.С., Масштабно-инвариантные свойства двухфазной области концентрационного переохлаждения, Вестник Удмуртского университета, 2012, Вып. 1, С. 43-54.
- 3) Krutikova E., Ivanov A., Structure properties of polydisperse magnetic fluids, Solid State Phenomena, 2012, Vol. 190, P. 641-644.

3. Обобщение и оценка результатов исследований; анализ моделей, методов, программ и алгоритмов, позволяющих увеличить объем знаний для более глубокого понимания изучаемого предмета исследования.

Оценивая степень решения проблем в предметной области темы работ, следует подчеркнуть, что при всем высоком фиксируемом научном российском и мировом интересе к проблематике, глубина и проработанность задач проблематики оставляют значительное по масштабам и глубине поле для продолжения и развития исследований в данном направлении. Выполненные в рамках НИР исследования **затрагивают неохваченные ранее реальные задачи моделирования процессов кристаллизации льда с учетом снеговой шапки на поверхности льда и вынужденной конвекции, расчета теплового потока, исходящего в атмосферу, расчета вклада отражательной способности льда в тепловой баланс между океаном и атмосферой для моделей как изотермического океана, так и для моделей, учитывающих турбулентные потоки тепла и массы. Для всех рассмотренных в рамках НИР задач в предметной области работ отсутствуют российские и мировые аналоги решений, современная наработки в теории и практике решения задач кристаллизации (в том числе разработки авторов коллектива) к обозначенным направлениям ранее не применялись.**

Основными научными задачами, решаемыми в рамках проекта, являлись следующие проблемы, входящие в направления развития науки в Российской Федерации, традиционно заинтересованной в изучении проблем Севера (в том числе проблемами и приложениями задач кристаллизации льдов и определения влияний тепловых потоков на теплообмен между океаном и атмосферой):

1. Разработка и решение нестационарной модели, описывающей структурно-фазовые переходы при замерзании льда с учетом вынужденной конвекции (модель изотермического океана).

2. Разработка и решение нестационарной модели, описывающей структурно-фазовые переходы при замерзании льда при учете снеговой шапки на поверхности льда (модель изотермического океана).
3. Разработка и решение нестационарной модели, описывающей структурно-фазовые переходы при замерзании льда с учетом снеговой шапки на поверхности льда и вынужденной конвекции; расчет теплового потока, исходящего в атмосферу, расчет вклада отражательной способности льда в тепловой баланс между океаном и атмосферой (модель изотермического океана).
4. Разработка и решение нестационарной модели, описывающей структурно-фазовые переходы при замерзании льда с учетом снеговой шапки на поверхности льда и вынужденной конвекции (модель турбулентного течения жидкости в океане).
5. Расчет теплового потока, исходящего в атмосферу, расчет вклада отражательной способности льда в тепловой баланс между океаном и атмосферой (модель турбулентного течения жидкости в океане).

Таким образом, проводя обобщение и оценку результатов исследований, а именно: **анализ моделей, методов, программ и алгоритмов**, следует отметить, что основной конструктивный вклад в дополнение существующего объема знаний по тематике предмета исследований, носят указанные разработанные модели тепломассопереноса.

Приведем далее полный перечень моделей и методов, созданных разработанных в рамках проекта:

1. **Нестационарная модель и метод ее решения** в описании структурно-фазовых переходов при замерзании льда с учетом вынужденной конвекции (модель изотермического океана).
2. **Нестационарная модель и метод ее решения** в описании структурно-фазовых переходов при замерзании льда при учете снеговой шапки на поверхности льда (модель изотермического океана).

3. **Нестационарная модель и метод ее решения** в описании структурно-фазовых переходов при замерзании льда с учетом снеговой шапки на поверхности льда и вынужденной конвекции. (модель изотермического океана).

4. **Метод** расчета теплового потока, исходящего в атмосферу и вклада отражательной способности льда в тепловой баланс между океаном и атмосферой для модели изотермического океана).

5. **Нестационарная модель и метод ее решения** в описании структурно-фазовых переходов при замерзании льда с учетом снеговой шапки на поверхности льда и вынужденной конвекции (модель турбулентного течения жидкости в океане).

6. **Метод** расчета теплового потока, исходящего в атмосферу и вклада отражательной способности льда в тепловой баланс между океаном и атмосферой для модели турбулентного течения жидкости в океане.

Следует отдельно отметить, что на основе теоретических разработок проекта планируется в 2012-2013 гг. внедрить новые математические модели и методы их решения в современные программные комплексы расчета структурно-фазовых переходов и теплофизических свойств льда, динамики тепловых потоков между океаном и атмосферой, оказывающих влияние на локальный теплообмен (погода в области).

4. Разработка рекомендаций по использованию результатов НИР для научно-образовательных курсов.

Результаты НИР, полученные в ходе выполнения работ по этапам 1-5 настоящего проекта рекомендованы к использованию при формировании программы курсов бакалавриата и ряда направлений магистратуры в том числе по следующим дисциплинам:

- Тепломассоперенос,
- Теплофизика
- Теоретическая теплотехника
- Нелинейная динамика затвердевания
- Гидромеханика
- Процессы тепломассопереноса и теплового излучения
- Уравнения математической физики в приложениях к тепловым системам

и т.д.

В Уральском федеральном университете, месте работы исполнителей и месте выполнения работ по проекту, соответственно, на момент завершения работ по пятому, заключительному этапу проекта «Нелинейный тепломассоперенос структурно-фазовых переходов и его влияние на прирост льда, его отражательную способность и теплообмен между океаном и атмосферой», результаты работ внедрены в содержание ряда курсов (обязательных и по выбору), предлагаемых для магистрантов первого и второго года обучения в Институте математики и компьютерных наук УрФУ. В перспективе двух лет ожидается внедрение результатов работ проекта не менее чем в 5 (пяти) дисциплинах для ряда направлений бакалавриата.

5. Подготовка итогового научно-технического отчета

При выполнении подготовки итогового научно-технического отчета по проекту, принимались во внимание следующие важнейшие выводы, полученные по результатам исследований текущего и предыдущего этапов:

1. На основании полученных на предыдущем этапе решений произведен расчет теплового потока, исходящего в атмосферу, расчет вклада отражательной способности льда в тепловой баланс между океаном и атмосферой.
2. Выполнен сравнительный анализ порядков вклада потока, исходящего с поверхности льда, и других вкладов в результирующий тепловой поток (например, тепло, выделяющееся при фазовом переходе без учета конвекции и слоя снега на поверхности льда; солнечная радиация).
3. Выполнена оценка влияния на величину потока скорости трения и турбулентных коэффициентов переноса тепла и массы.
4. Выполнен сравнительный анализ вкладов рассматриваемых теоретических исследований, явлений и эффектов в нелинейную динамику структурно-фазовых переходов при кристаллизации морского льда при условии изотермического и турбулентного течения жидкости в океане, вынужденной конвекции и покрытии поверхности льда снеговой шапкой. А именно, установлено влияние управляющих параметров системы на тепловой поток, исходящий с поверхности льда в атмосферу, а это, например, играет большую роль при увеличении скорости трения (изменение погоды при возникновении шторма).
5. Определены распределение температуры, солёности воды, поле скорости жидкости и динамика движения границ двухфазной зоны.

Закключение

На рис. 2 показаны распределения долей твердой и жидкой фаз во всей области фазового перехода, состоящей из котектической и основной двухфазных зон.

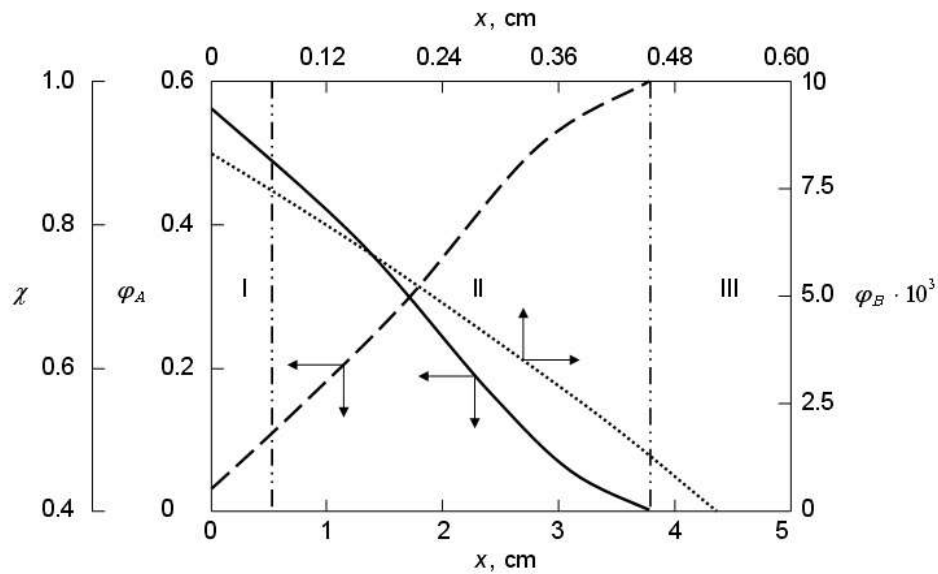


Рис. 2. Доли твердой фазы φ_A (сплошная линия) и φ_B (точечная линия), доля жидкой фазы χ (пунктирная линия) в зависимости от пространственной координаты $x = z - Vt$. Котектическая зона, основная зона и жидкая фаза соответственно расположены в регионах I, II и III (регионы изображены для нижней оси x вертикальными линиями). Теплофизические параметры расчетной системы приведены в таблице 1.

B_E	0.06
C_E	0.37
B_E^{AB}	0.10
B_∞	0.035
C_∞	0.152
T_E (°C)	–19
T_E^{AB} (°C)	–5
T_M (°C)	0
κ (см ² с ^{–1})	$1.1 \cdot 10^{-3}$
D_B (см ² с ^{–1})	$4.89 \cdot 10^{-6}$
L_V/k_S (с °C см ^{–2})	$1.52 \cdot 10^5$
k_L/k_S	0.25
G_S (°C см ^{–1})	5
G_L (°C см ^{–1})	0.5

Таблица 1. Расчетные параметры трехкомпонентной системы $H_2O - KNO_3 - NaNO_3$ по данным работ [47] и [48] (B и C соответствуют $NaNO_3$ и KNO_3 на основе обозначений работы [48]).

Доля твердого вещества φ_A компонента A , претерпевающего фазовое превращение в регионах I и II, монотонно убывает в области фазового перехода. В отличие от нее, доля твердого вещества φ_B компонента B , который претерпевает фазовое превращение лишь в регионе I, убывает только в котектической двухфазной зоне. При этом, протяженность котектической области I меньше основной области II фазового перехода. В соответствии с этими зависимостями, доля жидкой фазы χ монотонно возрастает во всей области фазового превращения (регионы I и II). При этом, в регионе I она определяется долями твердого φ_A и φ_B , а в регионе II –

лишь долью φ_A . По этой причине распределение χ_A также имеет точку перегиба в основной двухфазной зоне, как и функция φ_A . Проведенные расчеты показывают, что доли твердой и жидкой фазы на границах между регионами I и II, а также II и III являются непрерывными (они разрывны лишь на границе твердая фаза – зона котектики).

На рис. 3 изображены распределения концентраций примеси во всей области фазового перехода.

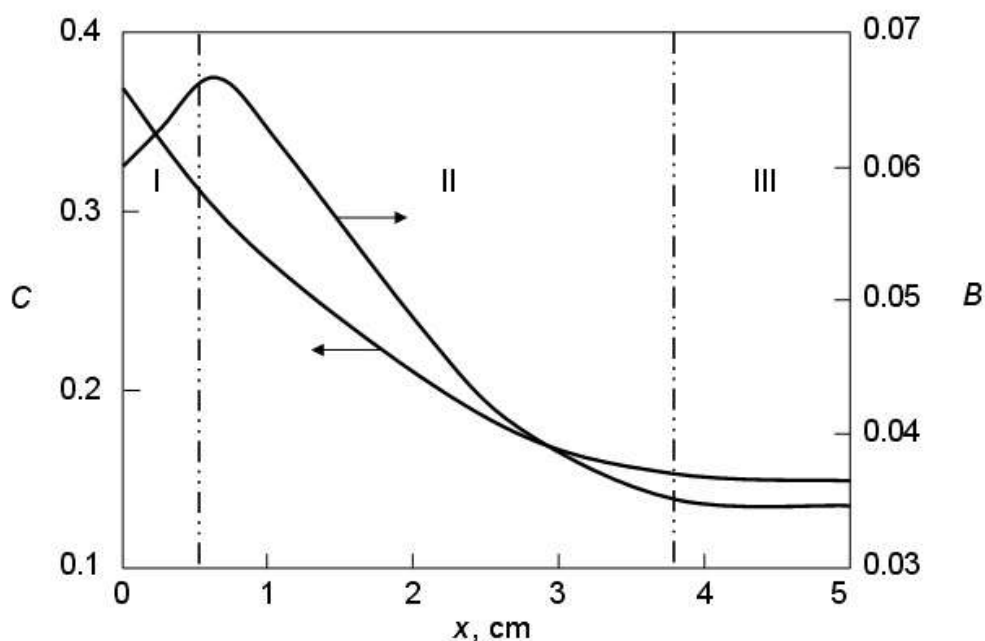


Рис. 3. Концентрации примеси C и B в зависимости от пространственной координаты $x = z - Vt$. Обозначения и расчетные параметры соответствуют рис. 2, $\delta_C = 0.53$ см, $\delta = 3.79$ см.

Основной примесный компонент, имеющий концентрацию C_A , монотонно убывает в регионах I и II вследствие вытеснения примеси растущей твердой фазой системы. В отличие от этой зависимости, имеющей традиционное поведение, концентрация примеси второго компонента B_A возрастает в зоне котектики, пересекает границу между регионами I и II, достигает максимума в основной двухфазной зоне, а затем убывает в этой зоне и в жидкой фазе стремясь к исходной концентрации B_∞ . Такое, на

первый взгляд необычное поведение концентрации примеси $B_{\text{ж}}$, объясняется тем, что компонент B претерпевает фазовый переход в регионе I (а это приводит к уменьшению концентрации вблизи границы твердая фаза – область котектики). Отметим, что аналогичное поведение концентрации примеси $B_{\text{ж}}$ было получено при анализе нестационарной автомодельной кристаллизации в работах [49-53], а также в экспериментах [47]. Однако, в этих работах точка максимума была найдена на границе регионов I и II. Причиной смещения максимума в регион II, является то обстоятельство, что в работах [49-53] были использованы приближенные уравнения диффузии примеси Шейла [45, 46] (уравнения без диффузионных слагаемых). Поэтому смещение максимума в глубь основной двухфазной зоны объясняется влиянием диффузионного транспорта примеси $B_{\text{ж}}$ в реальной трехкомпонентной системе. Найденные на данном этапе работ аналитические решения среди прочего позволяют исследовать динамическую устойчивость затвердевания трехкомпонентных систем (которая ответственна за слоистую ликвацию примеси) по аналогии с теорией устойчивости, развитой в работах [57-60] для бинарных расплавов.

Направление проделанной работы, таким образом, полностью соответствует заявленной тематике исследования по направлению «Геофизика», является актуальным и имеет перспективы коммерциализации, внедрения инноваций в образовательный процесс и углубления изучения социально-значимых проблем управления климатом, геофизическими явлениями, задачам получения управляющих параметров систем, претерпевающих структурные и фазовые превращения, нахождения максимально эффективных путей получения веществ с заданными свойствами.

Таким образом, все ожидаемые результаты Этапа 5 Государственного контракта № 161.740.11.0356 от «7» октября 2010г. «Нелинейный тепломассоперенос структурно-фазовых переходов и его влияние на

прирост льда, его отражательную способность и теплообмен между океаном и атмосферой» достигнуты. Настоящий отчет является заключительным, обобщающим отчетом по всем проведенным пяти этапам работ по настоящему проекту. Все результаты, заявленные к достижению на стадии заключения государственного контракта по проекту, выполнены; реализацию проекта следует признать успешной.

Список использованных источников

Основные источники, использованные в тексте настоящего научно-технического отчета:

1. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов.— М.: Мир, 1974, 544 с.
2. Флемингс М. Процессы затвердевания. — М.: Мир, 1977, 423 с.
3. Оно А. Затвердевание металлов. — М.: Metallurgia, 1980, 152 с.
4. Иванцов Г.П. Диффузионное переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава. — ДАН СССР, 1951, **81**, № 2, с. 179–182.
5. Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization. — New–York – Wallingford: Begell House, 2001, 183 p.
6. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Emergence of a mushy region in processes of binary melt solidification.— Int. J. Fluid Mech. Research, 1999, **26**, N 2, p. 248-264.
7. Alexandrova I.V., Alexandrov D.V., Aseev D.L., Bulitcheva S.V. Mushy layer formation during solidification of binary alloys from a cooled wall: the role of boundary conditions.— Acta Physica Polonica A, 2009, **115**, p. 791-794.
8. Alexandrov D.V. Incipience of a mushy zone in binary melt solidification processes.— Int. J. Fluid Mech. Research, 2000, **27**, N 2-4, p. 223-238.
9. Александров Д.В. К теории зарождения двухфазной зоны концентрационного переохлаждения.— Доклады АН, 2003, **392**, с. 322-327.
10. Stefan J. Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere. — Ann. Phys. Chem., 1891, **42**, p. 269–286.

11. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy.— J. Appl. Phys., 1964, **35**, p. 444-451.
12. Sekerka R.F. A stability function for explicit evaluation of the Mullins-Sekerka interface stability criterion.— J. Appl. Phys., 1965, **36**, p. 264-268.
13. Sekerka R.F. Morphological stability.— J. Crystal Growth, 1968, **3-4**, p. 71-81.
14. Александров Д.В., Мансуров В.В., Галенко П.К., Морфологическая устойчивость плоской границы раздела фаз бинарного расплава в процессах высокоскоростной кристаллизации.— Доклады АН, 1996, **351**, с. 37-39.
15. Wollkind D.J., Segel L.A., A nonlinear stability analysis of the freezing of a dilute binary alloy.— Philos. Trans. Roy. Soc. A, 1970, **268**, p. 351-380.
16. Alexandrov D.V. A nonlinear instability analysis of crystallization processes with a two-phase zone.— J. Metast. Nanocryst. Mater., 2004, **20-21**, p. 468-475.
17. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при вынужденном конвективном течении и кристаллизации бинарной жидкости.— Вестн. Удмурт. Ун-та, 2010, **1**, с. 3-16.
18. Alexandrov D.V., Galenko P.K., Herlach D.M. Selection criterion for the growing dendritic tip in a non-isothermal binary system under forced convective flow.— Journal of Crystal Growth, 2010, **312**, p. 2122–2127.
19. Асеев Д.Л., Александров Д.В., Нелинейная динамика затвердевания бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной.— Доклады АН, 2006, **408**, с. 609-613.

20. Aseev D.L., Alexandrov D.V., Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer.– International Journal of Heat and Mass Transfer, 2006, **49**, p. 4903–4909.

21. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной.– Расплавы, 2011, **1**, с. 16-30.

22. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary. - J. Fluid Mech., 1986, **167**, - p. 481-501.

23. Alexandrov D.V. The effect of concentrational supercooling on the morphological stability of self-similar solidification with a planar front.– Doklady Physics, 2001, **46**, p. 453-458.

24. Alexandrov D.V. Absolute morphological stability of the self-similar solidification with a planar front.– J. Metast. Nanocryst. Mater., 2004, **20-21**, p. 476-481.

25. Alexandrov D.V. Self-similar solidification: morphological stability of the regime.– Int. J. Heat Mass Transfer, 2004, **47**, p. 1383-1389.

26. Александров Д.В., Асеев Д.Л. Влияние термодиффузии на морфологическую устойчивость процесса автомодельного затвердевания с плоским фронтом.– Расплавы, 2005, **2**, 50-62.

27. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. К теории нестационарного затвердевания при наличии двухфазной зоны.– Расплавы, 2008, **5**, с. 69-76.

28. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. Автомодельное затвердевание с двухфазной зоной от охлаждаемой стенки.– Вестн. Удмурт. Ун-та, 2008, **1**, с. 14-25.

29. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Malygin A.P. Self-similar solidification of binary alloys.— *Acta Physica Polonica A*, 2009, **115**, p. 795-799.
30. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Dynamic stability analysis of the solidification of binary melts in the presence of a mushy region: changeover of instability.— *Journal of Crystal Growth*, 2000, **210**, p. 797–810.
31. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone. — *Q. J. Mech. Appl. Math.*, 1983, **36**, p. 505–539.
32. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987, 224 с.
33. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy zone: exact analytical solution.— *Int. J. Fluid Mech. Research*, 2000, **27**, N 2-4, p. 213-222.
34. Александров Д.В. К теории затвердевания с квазиравновесной двухфазной зоной.— *Доклады АН*, 2000, **375**, с. 172-176.
35. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: analytical solution of nonlinear model.— *J. Crystal Growth*, 2001, **222**, p. 816-821.
36. Alexandrov D.V., Aseev D.L. One-dimensional solidification of an alloy with a mushy zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity.— *J. Fluid Mechanics*, 2005, **527**, p. 57-66.
37. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity.— *Computational Materials Science*, 2006, **37**, p. 1-6.
38. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection.— *Acta Materialia*, 2006, **54**, p. 2401-2406.

39. Александров Д.В., Малыгин А.П. Аналитическое описание кристаллизации морской воды в трещинах льдов и их влияние на теплообмен между океаном и атмосферой.– Доклады АН, 2006, **411**, с. 390-394.
40. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G., Huang H.-N., Lee D. Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem.– Int. J. Heat Mass Transfer, 2007, **50**, p. 3616-3623.
41. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Malygin A.P., Huang H.-N., Lee D. Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem.– J. Phys.: Cond. Matt., 2008, **20**, p. 114105-01-06.
42. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Lee D., Huang H.-N. Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean.– Int. J. Fluid Mech. Research, 2010, **37**, N 1, p. 1-14.
43. Александров Д.В., Низовцева И.Г., Нелинейная динамика ложного дна при замерзании морской воды.– Доклады АН, 2008, **419**, с. 262-265.
44. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. To the theory of underwater ice evolution, or nonlinear dynamics of “false bottoms.– Int. J. Heat Mass Transfer, 2008, **51**, p. 5204-5208.
45. Scheil E. Bemerkungen zur schichtkiistallbildung. – Zeichrift fur Metallkunde, 1942, **34**, p. 70–72.
46. Kerr R.C., Woods A.W., Worster M.G., Huppert H.E. Solidification of an alloy cooled from above. Part 1. Equilibrium growth. – J. Fluid Mech., 1990, **216**, p. 323–342.

47. Aitta A., Huppert H.E., Worster M.G. Diffusion-controlled solidification of a ternary melt from a cooled boundary.— J. Fluid Mech., 2001, **432**, p. 201–217.
48. Anderson D.M. A model for diffusion-controlled solidification of ternary alloys in mushy layers.— J. Fluid Mech., 2003, **483**, p. 165–197.
49. Александров Д.В., Иванов А.А. Задача Стефана затвердевания трехкомпонентных систем при наличии движущихся областей фазового перехода. – ЖЭТФ, 2009, **135**, с. 942–950.
50. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Analytical solution for a problem of directional solidification in a ternary system. – Acta Physica Polonica A, 2009, **115**, p. 786–790.
51. Александров Д.В. Нелинейная динамика затвердевания трехкомпонентных систем. – Доклады Академии Наук, 2008, **422**, с. 322–326.
52. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers.— Heat Mass Transfer, 2009, **45**, p. 1467-1472.
53. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers. – Int. J. Heat Mass Transfer, 2009, **52**, p. 4807–4811.
54. Buffett B.A. Earth's core and the geodynamo. – Science, 2007, **288**, p. 2007-2012.
55. Fedotov S., Bashkirtseva I., Ryashko L. Stochastic dynamo model for subcritical transition. – Phys. Rev. E, 2006, **73**, p. 066307-066311.

56. Fedotov S., Bashkirtseva I., Ryashko L. Stochastic analysis of subcritical amplification of magnetic energy in a turbulent dynamo. – Physica A, 2004, **342**, p. 491-506.

57. Александров Д.В., Мансуров В.В. Динамическая неустойчивость квазистационарного процесса затвердевания бинарного расплава при наличии узкой квазиравновесной двухфазной зоны. – Кристаллография, 1996, **41**, N 2, с. 376-378.

58. Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Dynamic stability of a solidification process of a binary melt in the presence of a broad quasiequilibrium mushy region. – Scripta Materialia, 1996, **35**, N 7, p. 787-790.

59. Александров Д.В., Мансуров В.В. Динамическая устойчивость квазистационарного процесса затвердевания бинарного расплава при наличии широкой квазиравновесной двухфазной зоны. – Кристаллография, 1997, **42**, N 3, с. 402-404.

60. Alexandrov D.V. Linear analysis of dynamic instability of solidification with a quasiequilibrium mushy zone.– Int. J. Fluid Mech. Research, 2000, **27**, N 2-4 p. 239-247.

Приложение 1. Копии экспертных заключений и статей, опубликованных по результатам исследований.

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной работе
ОУ ВНО «УрГУ»



Экспертное заключение о возможности опубликования

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт)

математико-механического факультета

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М. Горького», рассмотрев статью Малыгина А.П., Александрова Д.В. «Аналитическое описание квазистационарной кристаллизации трехкомпонентных систем» 35 стр.

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует
(следует ли)

получить разрешение _____

(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Заключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)

Декан математико-механического факультета

(должность, подпись, инициалы и фамилия)

М.О. Асанов

Главный специалист ОНТИ УНИ

(подпись)

Н.П. Невраева

Начальник Первого отдела

(подпись)

А.Г. Гришин

Analytical Description of the Quasi-Stationary Solidification of Ternary Systems

A. P. Malygin and D. V. Alexandrov

Ural State University, pr. Lenina 51, Yekaterinburg, 620083 Russia

e-mail: Alexey.Malygin@usu.ru

Received May 24, 2011

Abstract—The directional solidification of ternary systems at a constant rate is studied. The following analytical solutions to the problem are found: the temperature and concentration distributions and the fractions of the solid phases of solidifying components in the parent and cotectic mushy zones, which represent a phase transition region. The solidification rate and the mushy zone lengths are determined.

DOI: 10.1134/S0036029512020139

INTRODUCTION

The presence of an impurity is known to radically change the solidification characteristics of melts and solutions [1–3]. Concentration supercooling, which was first detected in [4], is one of the most important effects that appear during solidification (the mechanism of appearance of this type of supercooling and its specific features were comprehensively described in book [5] in comparison with thermal supercooling). The numerical simulation of solidification from a cooled wall performed in [6, 7] and the approximate theory of this process developed in [8, 9] show that concentration supercooling appears rather fast (within several minutes) after the beginning of solidification. After a supercooled region forms in front of a solid–melt phase transition boundary, solidification cannot be described in terms of the classical thermodiffusion Stefan problem with a plane front [10]. The reaction of the system to the formation of concentration supercooling is the formation of conditions for the predominant growth of solid phase projections into a supercooled melt. In other words, a plane phase transition front boundary becomes morphologically unstable.

A linear analysis of this instability for the solidification of a plane front at a constant rate was performed for the first time in classical works [11–13], and the authors of [14] generalized this problem to the case of locally nonequilibrium solidification. This analysis showed the presence of a parameter range during solidification in which instability can result in complex impurity distribution structures. To calculate the parameters of such structures, the authors of [15] developed a nonlinear theory of the stability of a plane interface (in [16], this theory was applied for a nonlinear analysis of the stability of a break surface simulating the phase transition region). The growth structures

of the solid phase in the phase transition region, the space between which is filled with a supercooled liquid, form a two-phase region (mushy layer) located between purely solid and liquid phases in the system. Solidification in the presence of this mushy layer becomes much more complex than the frontal solidification process. For example, both the growth of dendrite structures [17, 18] and homogeneous nucleation of solid-phase particles on dissolved impurities [19–21] can occur in the phase transition region. The conditions of the region formation before a plane front were theoretically studied for nonstationary solidification under self-similar conditions [22–29]. It should be noted that the instability can change its type (from a soft into a hard type) when the thermophysical parameters change [30].

The mathematical model of the solidification of binary compounds with a mushy layer was first generalized in [31, 32]. This model represents a nonlinear nonstationary set of equations in a mushy layer and solid and liquid phases that are related by boundary conditions at the moving solid phase–mushy layer and mushy layer–liquid phase interfaces. There are no general methods for solving such complex problems with moving boundaries, and the further development of the theory was associated with the development of approximate methods for solving this problem. A significant simplification can be achieved in considering the intense solid phase growth in the mushy layer when the releasing latent heat of solidification compensates for the concentration supercooling.

For the case of solidification of binary systems, we [33–38] developed methods to obtain exact analytical solutions to nonlinear heat-and-mass transfer equations for solidification at a constant rate, which are based on passing to a new independent variable,

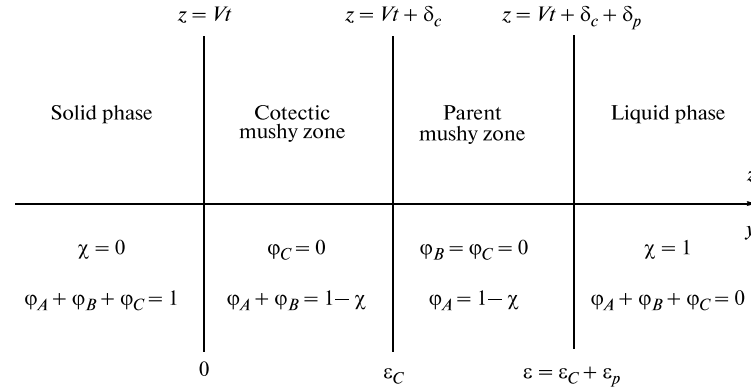


Fig. 1. Schematic diagram for the directional solidification of a ternary system with two phase transition zones.

namely, the fraction of a solid phase in the phase transition region (in those works, the theory was also generalized to the case of weak convection, thermodiffusion effects, and the temperature dependence of the diffusion coefficient). In [27–29], we developed methods for solving mushy layer equations for the solidification of binary melts under self-similar conditions, which are based on the expansion of temperature, the impurity concentration, and the fraction of a solid phase in power series. This theory was generalized in [39–44] to the case of solving mushy layer equations under strongly nonstationary solidification conditions (here, we used the Scheil equations [45, 46] and some additional estimations of the system parameters).

It is often necessary to take into account the presence of a third component in a system. Basic convective-free solidification equations in such a system were developed in [48] using the experimental data from [47]. Because of a strong nonlinearity of the system, Anderson [48] obtained its analytical solutions only for the case of absent diffusion at a zero latent heat of solidification. Later, we [49, 50] developed an approximate theory to solve the nonlinear equations in [48] under self-similar conditions without diffusion and for linear liquidus and cotectic equations. The authors of [51–53] developed methods to take into account diffusion [51, 52] and the deviations of these equations from linear relationships [53]. On the whole, the theory in [49–53] well describes the experimental data under self-similar solidification conditions. In this work, we propose a method to solve the mathematical model in [48], which describes the solidification of ternary systems under stationary conditions, when the solidification rate, the temperature distribution, the impurity concentration, and the fraction of a solid

phase in the system become steady and cease to depend on time.

MODEL FOR THE DIRECTIONAL SOLIDIFICATION OF A TERNARY SYSTEM

We analyze the directional solidification of a ternary system along spatial axis z (Fig. 1). Let A be the solvent concentration and B and C be the concentrations of two solutes, $A + B + C = 1$. Since the parent substance undergoes a phase transition in a region that does not coincide with the phase transition region of the second substance, two mushy zones, namely, parent and cotectic ones, appear during solidification. Their lengths are designated as δ_p and δ_c . Taking into account the fact that the phase diagram of this system was comprehensively discussed in [48, 49], we will not dwell on the liquidus, cotectic, and eutectic equations. It is important that the temperature field relaxation time $\tau_T \sim l^2/\kappa$ is much shorter than the characteristic times of concentration field relaxation times $\tau_B \sim l^2/D_B$ and $\tau_C \sim l^2/D_C$, i.e., $\tau_T \ll \tau_C$ and $\tau_T \ll \tau_B$, where l is the characteristic length scale, κ is the thermal diffusivity, and D_B and D_C are the diffusion coefficients of impurities B and C , respectively. As follows from this estimation of the relaxation times, the derivatives of temperature with respect to time t are much smaller than the other terms of the corresponding model equations. Allowing for this circumstance, we write a mathematical model for solidification using the results from [48].

In the liquid phase (melt) of the system, impurity concentrations B_∞ and C_∞ and temperature gradient G_L are specified quantities; that is,

$$B \rightarrow B_\infty, \quad C \rightarrow C_\infty, \quad z \rightarrow \infty, \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = G_L, \quad z > Vt + \delta = Vt + \delta_c + \delta_p, \quad (2)$$

where T is the temperature and V is the constant solidification rate. Moreover, the following impurity diffusion equations are satisfied in the liquid phase:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 B}{\partial z^2}, \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D_C \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad z > Vt + \delta. \quad (3)$$

The boundary conditions at the parent mushy layer–melt interface, which have the physical meaning of the balance of heat, mass, and continuity conditions, are written as follows:

$$L_V V [\varphi_A]_-^+ = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, \quad (4)$$

$$[T]_-^+ = [B]_-^+ = [C]_-^+ = 0, \quad z = Vt + \delta,$$

$$BV [\varphi_A]_-^+ = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad (5)$$

$$CV [\varphi_A]_-^+ = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt + \delta,$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^+ = m_B \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ + m_C \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)^+, \quad z = Vt + \delta. \quad (6)$$

Here, L_V is the latent heat of solidification; $\bar{k} = k_L \chi + k_S (1 - \chi)$; k_L and k_S are the heat-transfer coefficients of the melt and solid phase, respectively; χ is the fraction of the liquid phase; m_B and m_C are the liquidus slopes of components B and C , respectively; and φ_A is the fraction of the solid phase of component A . Symbols $[\cdot]_-^+$ and $(\cdot)^+$ designate the jump of a quantity at the interface and its value on the right of the interface. Note that Eq. (6) has the meaning of the marginal equilibrium condition from [48].

In the parent mushy zone, where component A undergoes a phase transition ($\chi = 1 - \varphi_A$), heat-and-mass transfer equations are written in the form

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{dT}{dz} \right) + L_V \frac{\partial \varphi_A}{\partial t} = 0,$$

$$T \equiv T^L(B, C) = T_M + m_B B + m_C C, \quad (7)$$

$$Vt + \delta_c < z < Vt + \delta,$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi B) = 0,$$

$$D_C \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi C) = 0, \quad (8)$$

$$Vt + \delta_c < z < Vt + \delta,$$

where T_M is the phase-transition temperature of the pure substance.

We now write boundary conditions at the second interface between the cotectic and parent mushy zones. These conditions reflect the balance of heat and mass

and the continuity of the temperature field and the impurity concentration fields and are written as [48]

$$L_V V [\varphi_A + \varphi_B]_-^+ = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, [T]_-^+ = [B]_-^+ = [C]_-^+ = 0, \quad (9)$$

$$m_B^c \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ = m_C^c \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)^+, \quad z = Vt + \delta_c,$$

$$V \{ B [\varphi_A]_-^+ + (B - 1) [\varphi_B]_-^+ \} = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad (10)$$

$$VC [\varphi_A + \varphi_B]_-^+ = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt + \delta_c.$$

Here, φ_B is the fraction of the solid phase of component B and m_B^c and m_C^c are the cotectic slopes of the liquidus of components B and C , respectively.

Heat-and-mass transfer equations in the cotectic mushy zone, where components A and B undergo phase transitions ($\chi = 1 - \varphi_A - \varphi_B$) are written as

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + L_V \frac{\partial (\varphi_A + \varphi_B)}{\partial t} = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_c, \quad (11)$$

$$B \equiv B^c(T) = B_E - \frac{T - T_E}{m_B^c}, \quad (12)$$

$$C \equiv C^c(T) = -\frac{T - T_E^{AB}}{m_C^c}, \quad Vt < z < Vt + \delta_c,$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi B + \varphi_B) = 0, \quad (13)$$

$$D_C \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi C) = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_c.$$

Here, T_E , B_E , and C_E are the known temperature and impurity concentrations at the eutectic point of the ternary system, respectively, and T_E^{AB} is the temperature at the eutectic point of the corresponding binary system (see, e.g., [48, 49]).

The boundary conditions at the solid phase–cotectic zone interface have the form

$$L_V V [\varphi_A + \varphi_B + \varphi_C]_-^+ = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, \quad (14)$$

$$T = T_E, \quad B = B_E, \quad C = C_E, \quad z = Vt,$$

$$V \{ B [\varphi_A]_-^+ + (B - 1) [\varphi_B]_-^+ + B [\varphi_C]_-^+ \} = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt, \quad (15)$$

$$V \{ C [\varphi_A]_-^+ + C [\varphi_B]_-^+ + (C - 1) [\varphi_C]_-^+ \} = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt. \quad (16)$$

In the solid phase, we have a constant temperature gradient G_S ; that is,

$$\partial T / \partial z = G_S, \quad z < Vt. \quad (17)$$

The set of Eqs. (1)–(17) represent a closed set of equations and boundary conditions for searching for the solution to the problem of the solidification of a ternary system at a constant rate.

EXACT ANALYTICAL SOLUTIONS FOR A NONLINEAR MODEL

We pass to a coordinate system moving at a constant velocity V and introduce the following dimensionless variables and parameters:

$$y = \frac{V(z - Vt)}{D_B}, \quad \varepsilon_p = \frac{V\delta_p}{D_B}, \quad \varepsilon_C = \frac{V\delta_C}{D_B}, \quad \varepsilon = \frac{V\delta}{D_B}, \quad (18)$$

$$D_{BC} = \frac{D_B}{D_C}, \quad \theta = \frac{T}{m_B B_\infty}, \quad m_{CB} = \frac{m_C}{m_B}, \quad m_{CB}^C = \frac{m_C^C}{m_B^C}.$$

In this new coordinate system, solidification is steady and all unknown functions are time-independent.

Diffusion equations (3) in variables (18) under boundary conditions (1) have the following integrals:

$$B(y) = B_\infty + B_1 \exp(-y), \quad (19)$$

$$C(y) = C_\infty + C_1 \exp(-D_{BC}y), \quad y > \varepsilon = \varepsilon_C + \varepsilon_p,$$

where B_1 and C_1 are constants of integration. We integrate heat-and-mass transfer equations (7) and (8) in the parent mushy zone and find the derivatives of temperature and impurity concentrations,

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B(L_V V \varphi_A + A_1)}{m_B V B_\infty \bar{k}_p(\varphi_A)}, \quad (20)$$

$$\bar{k}_p(\varphi_A) = k_L(1 - \varphi_A) + k_S \varphi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon,$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_2 - BV(1 - \varphi_A)}{V(1 - \varphi_A)}, \quad (21)$$

$$\frac{dC}{dy} = \frac{D_{BC}(A_3 - CV(1 - \varphi_A))}{V(1 - \varphi_A)}, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon,$$

where $A_1 = \bar{k}_p(\varphi_{APL})G_{PL} - VL_V \varphi_{APL}$; A_2 and A_3 are constants of integration; and G_{PL} and φ_{APL} are the temperature gradient and the fraction of the solid phase at $y = \varepsilon$, respectively, determined on the side of the parent mushy zone. These unknowns will be found. We combine Eqs. (20) and (21) with liquidus equation (7) and find the relation between the B and C concentrations in the parent mushy zone,

$$B(\varphi_A) = g(\varphi_A) - D_{BC}m_{CB}C(\varphi_A), \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon,$$

$$g(\varphi_A) = \frac{A_2}{V(1 - \varphi_A)} + \frac{D_{BC}m_{CB}A_3}{V(1 - \varphi_A)} - \frac{D_B(L_V V \varphi_A + A_1)}{m_B V \bar{k}_p(\varphi_A)}. \quad (22)$$

From Eqs. (21) and (22), we now determine the fraction of a solid phase in the parent mushy zone in the form of the inverse relationship

$$y(\varphi_A) = \varepsilon_C + \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_A} S(\Phi_A) d\Phi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (23)$$

$$S(\Phi_A) = g'(\Phi_A) / g_1(\Phi_A),$$

$$g_1(\Phi_A)$$

$$= \frac{D_B}{m_B V \bar{k}_p(\Phi_A)} (L_V V (\Phi_A - \Phi_{APL}^-) + \bar{k}(\Phi_{APL}^-) G_{PL}).$$

Here, φ_{ACP}^+ means the fraction of a solid phase on the right of the cotectic–parent mushy zone interface. Then, from Eq. (23) we determine the lengths of the parent mushy zone (ε_p) and the entire phase transition region (ε),

$$\varepsilon_p = \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} S(\Phi_A) d\Phi_A, \quad \varepsilon = \varepsilon_C + \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} S(\Phi_A) d\Phi_A. \quad (24)$$

For simplicity, we consider the case $D_{BC} = 1$ [48]. When substituting Eq. (23) into Eq. (21), we find the impurity C concentration in the parent zone of the phase transition,

$$C(\varphi_A) = \left[A_4 + A_3 \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_A} \frac{S(\Phi_A) \exp(y(\Phi_A) - y(\varphi_A))}{V(1 - \Phi_A)} d\Phi_A \right], \quad (25)$$

$$\varepsilon_C < y < \varepsilon.$$

Equations (22)–(25) represent the parametric solution to the problem in the parent mushy zone, and the parameter is represented by the fraction of the solid phase φ_A (or $\chi = 1 - \varphi_A$) of the component solidifying in this zone.

Substituting solutions (22)–(25) into boundary conditions (4)–(6), we obtain the following expressions, which determine the unknown constants:

$$\frac{G_L D_B \exp(\varepsilon)}{V m_B} + B_1 + m_{CB} C_1 = 0, \quad (26)$$

$$G_{PL} = \frac{k_L G_L + L_V V \varphi_{APL}^-}{\bar{k}_p(\varphi_{APL}^-)}, \quad A_2 = V B_\infty, \quad A_3 = V C_\infty, \quad (27)$$

$$B_1 = [g(\varphi_{APL}^-) - B_\infty - m_{CB} C_\infty] \exp(\varepsilon) - m_{CB} C_1, \quad (28)$$

$$A_4 = [C_\infty + C_1 \exp(-\varepsilon)] \exp[\varepsilon - \varepsilon_C] - V C_\infty I_0,$$

$$I_0 = \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} \frac{S(\Phi_A) \exp[y(\Phi_A) - \varepsilon_C]}{V(1 - \Phi_A)} d\Phi_A. \quad (29)$$

Using Eqs. (26)–(28), we can express the fraction of the solid phase of component *A* on the left of the parent mushy zone–melt interface. Omitting the details of mathematical manipulations, we reduce this expression to the form

$$\Phi_{APL}^- \left[\frac{m_B V (B_\infty + m_{CB} C_\infty)}{1 - \Phi_{APL}^-} - \frac{D_B [L_V V - G_L (k_S - k_L)]}{k_L + (k_S - k_L) \Phi_{APL}^-} \right] = 0. \quad (30)$$

The integration of Eqs. (11)–(13) in the cotectic region of the phase transition gives the following expressions:

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B (L_V V (1 - \chi) + A_5)}{m_B V B_\infty \bar{k}_C(\chi)}, \quad (31)$$

$$\bar{k}_C(\chi) = k_L \chi + k_S (1 - \chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C,$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_6 - V(\chi B + \Phi_B)}{V\chi}, \quad \frac{dC}{dy} = \frac{A_7 - V\chi C}{V\chi}, \quad (32)$$

$$0 < y < \varepsilon_C.$$

Here, $A_5 = \bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} - L_V V (1 - \chi_{SC}^+)$; $\chi = 1 - \Phi_A - \Phi_B$; A_6 and A_7 are constants of integration; and G_{SC} and χ_{SC}^+ are the temperature gradient and the fraction of the liquid phase, respectively, on the right of the solid material–cotectic zone interface. These constants will be determined below.

We combine Eqs. (12), (31), and (32) and obtain the distributions of the temperature, the impurity concentrations, and the fractions of the solid phases of both components in the cotectic zone,

$$\theta(\chi) = \frac{T_E^{AB} - m_C^C C(\chi)}{m_B B_\infty}, \quad (33)$$

$$C(\chi) = \frac{1}{V\chi} \left(A_7 + \frac{F_0(\chi)}{m_C^C} \right), \quad 0 < y < \varepsilon_C,$$

$$B(\chi) = m_{CB}^C C(\chi) + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}, \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (34)$$

$$\Phi_A(\chi) = 1 - \chi - \Phi_B(\chi),$$

$$\Phi_B(\chi) = \frac{F_0(\chi)}{m_B^C V} + \frac{A_6}{V} - \chi B(\chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C. \quad (35)$$

Here, m_{CB}^C is determined in Eq. (18) and

$$F_0(\chi) = \frac{D_B \chi [\bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} + L_V V (\chi_{SC}^+ - \chi)]}{\bar{k}_C(\chi)}.$$

Allowing for

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{d\theta}{d\chi} \frac{d\chi}{dy},$$

we find the distribution of the fraction of the solid phase in the cotectic zone in the form of an inverse function and the dimensionless cotectic zone length,

$$y(\chi) = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0(\chi_1)} d\chi_1, \quad (36)$$

$$\varepsilon_C = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi_{CP}^-} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0(\chi_1)} d\chi_1,$$

where χ_{CP}^- is the fraction of the liquid phase on the left of the cotectic zone–parent mushy zone interface. Equations (33)–(36) represent the solutions to the problem in the cotectic zone of the phase transition. These solutions have a parametric form, as the solutions (22)–(25) in the parent mushy zone. However, the parameter here is the fraction of a liquid phase χ .

We now substitute these solutions into boundary conditions (14)–(16), take into account temperature gradient (17), and obtain the following relationships for the unknown constants:

$$G_{SC} = \frac{k_S G_S - L_V V \chi_{SC}^+}{\bar{k}_C(\chi_{SC}^+)},$$

$$V(\Phi_{BSC}^- - \Phi_{BSC}^+ - B_E \chi_{SC}^+) + V(B_E \chi_{SC}^+ + \Phi_{BSC}^+) = A_6,$$

$$V(\Phi_{CSC}^- - \Phi_{CSC}^+ - C_E \chi_{SC}^+) + V C_E \chi_{SC}^+ = A_7, \quad (37)$$

$$A_7 = V C_E \chi_{SC}^+ - \frac{D_B \chi_{SC}^+}{m_C^C} G_{SC}, \quad (38)$$

where Φ_{BSC}^- and Φ_{BSC}^+ are the fractions of the solid phase of component *B* on the left and right of the solid phase–cotectic zone interface and Φ_{CSC}^- and Φ_{CSC}^+ are analogous values for component *C*.

The substitution of the temperature derivatives from Eqs. (20) and (31) into the first boundary condition of (9) determines the explicit dependence of the solidification rate on the temperature gradients in the solid and liquid phases,

$$V = \frac{k_S G_S - k_L G_L}{L_V}. \quad (39)$$

Note that Eq. (39) coincides with the solidification rate of the plane front and the mushy zone, which describe the solidification of binary mixtures.

We now substitute the derivatives of the impurity concentrations from Eqs. (21) and (32) into boundary conditions (10) and find the constants,

$$A_6 = V B_\infty, \quad A_7 = V C_\infty. \quad (40)$$

When combining Eqs. (37), (38), and (40), we obtain a quadratic equation to search for the fraction of the liquid phase on the right of the solid phase–cotectic zone interface. Its solution is

$$\chi_{SC}^+ = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_2a_0}}{2a_2}, \quad (41)$$

$$a_0 = -Vk_S C_\infty, \quad a_1 = VC_E k_S - V(k_L - k_S)C_\infty - \frac{D_B k_S G_S}{m_C^C},$$

$$a_2 = \frac{D_B L_V V}{m_C^C} + VC_E (k_L - k_S).$$

Equation (41) has a single solution lying in a unit segment.

With boundary conditions (10), we can find the limiting values of impurity concentrations B_{CP} and $C_{CP} = A_4$ at the interfacial surface between the cotectic and parent zones of the phase transition,

$$B_{CP} = m_{CB}^C C_{CP} + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C} \quad (42)$$

$$= g(\varphi_{ACP}^+) - m_{CB}^C C_{CP},$$

$$C_{CP} = A_4 = \frac{1}{V\chi_{CP}^-} \times \left(VC_\infty + \frac{D_B \chi_{CP}^- [\bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} + L_V V (\chi_{SC}^+ - \chi_{CP}^-)]}{m_C^C \bar{k}_C(\chi_{CP}^-)} \right). \quad (43)$$

The substitution of B_{CP} from Eq. (42) into the second boundary condition of Eq. (9) determines an explicit relationship for the fraction of the solid phase on the right of the interface between the two-phase zones,

$$\varphi_{ACP}^+ = 1 - \frac{B_\infty - m_{CB}^C C_\infty}{B_*}, \quad B_* = B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}. \quad (44)$$

Equation (44) shows that φ_{ACP}^+ is only determined by the initial values of impurity concentrations B_∞ and C_∞ and the phase diagram of the ternary system.

With the derived equations, we can write the solution to Eq. (30) in the form

$$\varphi_{APL}^- = 0$$

or

$$\varphi_{APL}^- = \frac{H(G_S - G_L) - (B_\infty + m_{CB}^C C_\infty)k_L}{H(G_S - G_L) + (B_\infty + m_{CB}^C C_\infty)(k_S - k_L)},$$

$$H = \frac{D_B k_S}{m_B V}.$$

Since the second root does not belong to the unit segment, the first root ($\varphi_{APL}^- = 0$) should be taken as the solution.

Then, combining Eqs. (42) and (43), we find the fraction of the liquid phase on the left of the interface between the cotectic and the parent two-phase zones,

$$\chi_{CP}^- = \frac{-b_1 \pm \sqrt{b_1^2 - 4b_2b_0}}{2b_2}, \quad b_0 = -\frac{m_C^C C_\infty}{D_B}, \quad (45)$$

$$b_1 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+) - B_* m_C^C}{m_{CB}^C + m_{CB}} - \frac{m_C^C (k_L/k_S - 1)C_\infty}{D_B} - \frac{G_S}{V},$$

$$b_2 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+) - B_* m_C^C (k_L/k_S - 1)}{m_{CB}^C + m_{CB}} + \frac{L_V}{k_S}.$$

Taking into account that Eq. (45) fully determines constant A_4 from Eq. (43), we can use Eq. (29) to find constant C_1 .

Using Eqs. (37) and (38), we determine the fractions of the solid phase of both components on the left of the solid phase–cotectic zone interface,

$$\varphi_{BSC}^- = B_\infty, \quad \varphi_{CSC}^- = C_\infty. \quad (46)$$

The boundary conditions on the right of this surface are found from distributions (35) as $\varphi_{ASC}^+ = \varphi_A(\chi_{SC}^+)$ and $\varphi_{BSC}^+ = \varphi_B(\chi_{SC}^+)$. Moreover, distributions (35) also determine the boundary values of the fractions of the solid phase φ_{ACP}^- and φ_{BCP}^- of components A and B on the left of the interface between the cotectic and parent two-phase zones in the form $\varphi_{ACP}^- = \varphi_A(\chi_{CP}^-)$ and $\varphi_{BCP}^- = \varphi_B(\chi_{CP}^-)$.

CONCLUSIONS

Figure 2 shows the distributions of the fractions of solid and liquid phases over the entire phase transition region, which consists of cotectic and parent mushy zones. The fraction of solid substance φ_A of component A , which undergoes a phase transition in zones I and II, decreases monotonically in the phase transition region. However, the fraction of solid substance φ_B of component B , which undergoes a phase transition only in zone I, decreases only in the cotectic mushy zone. In this case, the length of cotectic zone I is smaller than that of parent region II of the phase transition. According to these dependences, the fraction of the liquid phase χ increases monotonically over the entire phase transition region (zones I and II). In zone I, it is determined by the fractions of solid phases φ_A and φ_B ; in zone II, it is only determined by the fraction of φ_A . Therefore, the $\chi(x)$ distribution also has an inflection point in the parent mushy zone, as the $\varphi_A(x)$ function. Our calculations show that the fractions of solid and liquid phases at the interfaces between zones I, II and II, III are continuous (they are broken only at the solid phase–cotectic zone interface).

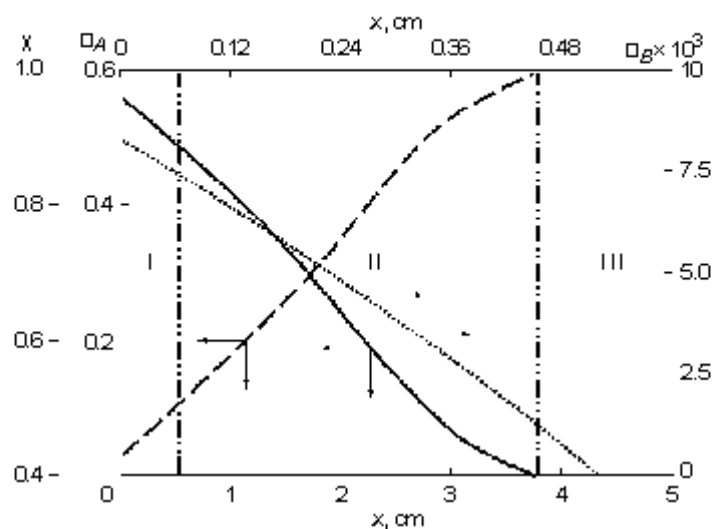


Fig 2. Fractions of solid phases (solid line) α_A and (dotted line) α_B and (dashed line) liquid phase χ vs the spatial coordinate $x = z - l\delta$. (I)–(III) Cotectic zone, parent mushy zone, and liquid phase, respectively (the zones are indicated by vertical lines normal to axis x). The thermophysical parameters of the system are given in the table.

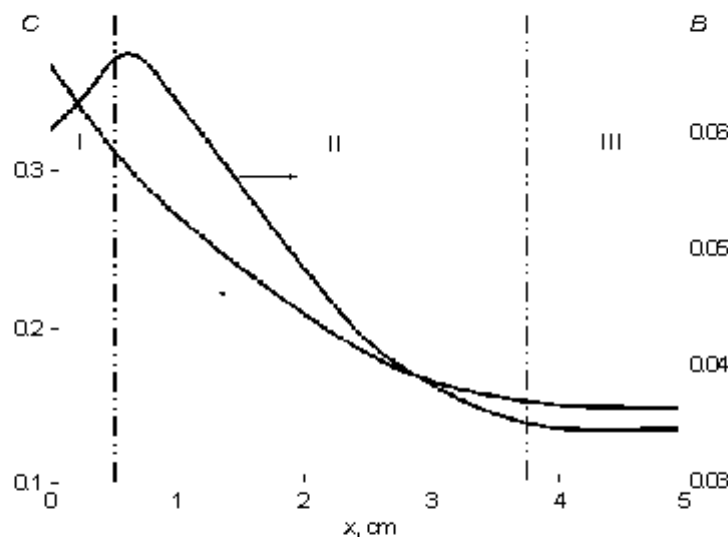


Fig 3. Concentrations of impurities C and B vs the spatial coordinate $x = z - l\delta$. The notations and calculated parameters are given in Fig. 2. $\delta_C = 0.53$ cm and $\delta = 3.79$ cm.

Figure 3 shows the distributions of the impurity concentrations over the entire phase transition region. The main impurity component has concentration $C(x)$ and decreases monotonically in zones I and II due to the rejection of the impurity by the solid phase growing in the system. In contrast to this dependence

(which has traditional behavior), the concentration of second-component impurity $B(x)$ increases in the cotectic zone, intersects the boundary between zones I and II, reaches a maximum in the parent mushy zone, decreases in this zone and in the liquid phase, and tends toward initial concentration B_0 . This unusual (at

Calculated parameters for the ternary $\text{H}_2\text{O}-\text{KNO}_3-\text{NaNO}_3$ system borrowed from [47, 48] (B and C correspond to NaNO_3 and KNO_3 , respectively, according to the notations of [48])

B_E	0.06	$T_E(^{\circ}\text{C})$	-19	$L_V/k_S (\text{s } ^{\circ}\text{C cm}^{-2})$	1.52×10^5
C_E	0.37	$T_E^{AB} (^{\circ}\text{C})$	-5	k_L/k_S	0.25
B_E^{AB}	0.10	$T_M(^{\circ}\text{C})$	0	$G_S (^{\circ}\text{C cm}^{-1})$	5
B_{∞}	0.035	$\kappa (\text{cm}^2 \text{s}^{-1})$	1.1×10^{-3}	$G_L (^{\circ}\text{C cm}^{-1})$	0.5
C_{∞}	0.152	$D_B (\text{cm}^2 \text{s}^{-1})$	4.89×10^{-6}	—	—

first glance) behavior of impurity concentration $B(x)$ is explained by the fact that component B undergoes a phase transition in zone I, which leads to a decrease in the concentration near the solid phase—cotectic zone interface. Note that analogous behavior of impurity concentration $B(x)$ was obtained during the theoretical analysis of nonstationary self-similar solidification in [49–53] and the experimental investigation in [47]. In those works, however, the point of maximum was found at the interface between zones I and II. The maximum shifts toward zone II due to the fact that the authors of [49–53] used the approximated Scheil equations of impurity diffusion (equations without diffusion terms) [45, 46]. Therefore, the displacement of the maximum toward the parent mushy zone is explained by the effect of the diffusion transport of impurity $B(x)$ in a real ternary system.

The theory proposed in this work describes the pulling of a crystal from a melt at a constant solidification rate (Czochralski growth technique) and can also describe the slow (almost steady) solidification processes at the interface of the internal (solid) Earth core that are responsible for geodynamo [54–56]. Moreover, the analytical solutions found in this work can be used to study the dynamic stability of the solidification of ternary systems (which is responsible for layer-by-layer impurity segregation) by analogy with the stability theory developed in [57–60] for binary melts.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 11-01-00137) and the Federal program Human Capital for Science and Education in Innovative Russia 2009–2013.

REFERENCES

1. R. Laudise and R. Parker, *The Growth of Single Crystals; Crystal Growth Mechanisms: Energetics, Kinetics and Transport* (Prentice-Hall, New York, 1970).
2. M. Flemings, *Solidification Processing* (McGraw-Hill, New York, 1974).
3. A. Ono, *Solidification of Metals* (Metallurgiya, Moscow, 1980).
4. G. P. Ivantsov, "Diffusion Supercooling during the Solidification of a Binary Alloy," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **81** (2), 179–182 (1951).
5. Yu. A. Buyevich, D. V. Alexandrov, and D. V. Mansurov, *Macrokinetics of Crystallization* (Begell House, New York, 2001).
6. D. V. Alexandrov, A. G. Churbanov, and P. N. Vabishchevich, "Emergence of a Mushy Region in Processes of Binary Melt Solidification," *Int. J. Fluid Mech. Research* **26** (2), 248–264 (1999).
7. I. V. Alexandrova, D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, and S. V. Bulitcheva, "Mushy Layer Formation during Solidification of Binary Alloys from a Cooled Wall: The Role of Boundary Conditions," *Acta Physica Polonica A* **115** (4), 791–794 (2009).
8. D. V. Alexandrov, "Incipience of a Mushy Zone in Binary Melt Solidification Processes," *Int. J. Fluid Mech. Research* **27** (2–4), 223–238 (2000).
9. D. V. Alexandrov, "On the Theory of the Nucleation of a Concentration Supercooling Mushy Zone," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **392**, 322–327 (2003).
10. J. Stefan, "Über die Theorie der Eisbildung, Insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere," *Ann. Phys. Chem.* **42**, 269–286 (1891).
11. W. W. Mullins and R. F. Sekerka, "Stability of a Planar Interface during Solidification of a Dilute Binary Alloy," *J. Appl. Phys.* **35**, 444–451 (1964).
12. R. F. Sekerka, "A Stability Function for Explicit Evaluation of the Mullins–Sekerka Interface Stability Criterion," *J. Appl. Phys.* **36**, 264–268 (1965).
13. R. F. Sekerka, "Morphological Stability," *J. Crystal Growth* **3–4**, 71–81 (1968).
14. D. V. Alexandrov, V. V. Mansurov, and P. K. Galenko, "Morphological Stability of the Plane Interface of the Phases in a Binary Melt during High-Rate Solidification," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **351**, 37–39 (1996).
15. D. J. Wollkind and L. A. Segel, "A Nonlinear Stability Analysis of the Freezing of a Dilute Binary Alloy," *Philos. Trans. Roy. Soc. A* **268**, 351–380 (1970).
16. D. V. Alexandrov, "A Nonlinear Instability Analysis of Crystallization Processes with a Two-Phase Zone," *J. Metast. Nanocryst. Mater.* **20–21**, 468–475 (2004).
17. D. V. Alexandrov, P. K. Galenko, A. P. Malygin, and D. M. Herlach, "Selection of a Stable Growth Mode of a Parabolic Dendrite Tip during the Forced Convective Flow and Solidification of a Binary Liquid," *Vestn. Udmurt. Univ.* **1**, 3–16 (2010).

18. D. V. Alexandrov, P. K. Galenko, and D. M. Herlach, "Selection Criterion for the Growing Dendritic Tip in a Non-Isothermal Binary System under Forced Convective Flow," *J. Crystal Growth* **312**, 2122–2127 (2010).
19. D. L. Aseev and D. V. Aleksandrov, "Nonlinear Solidification Dynamics of Binary Melts with a Nonequilibrium Mushy Zone," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **408**, 609–613 (2006).
20. D. L. Aseev and D. V. Alexandrov, "Directional Solidification of Binary Melts with a Non-Equilibrium Mushy Layer," *Int. J. Heat Mass. Transfer* **49**, 4903–4909 (2006).
21. D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, and A. P. Malygin, "On the Theory of the Solidification Processes with a Non-equilibrium Mushy Zone," *Rasplavy* **1**, 16–30 (2011).
22. M. G. Worster, "Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.* **167**, 481–501 (1986).
23. D. V. Alexandrov, "The Effect of Concentrational Supercooling on the Morphological Stability of Self-similar Solidification with a Planar Front," *Doklady Physics* **46**, 453–458 (2001).
24. D. V. Alexandrov, "Absolute Morphological Stability of the Self-Similar Solidification with a Planar Front," *J. Metast. Nanocryst. Mater.* **20–21**, 476–481 (2004).
25. D. V. Alexandrov, "Self-Similar Solidification: Morphological Stability of the Regime," *Int. J. Heat Mass Transfer* **47**, 1383–1389 (2004).
26. D. V. Alexandrov and D. L. Aseev, "Effect of Thermodiffusion on the Morphological Stability of Self-Similar Solidification with a Plane Front," *Rasplavy* **2**, 50–62 (2005).
27. D. V. Alexandrov, A. A. Ivanov, and A. P. Malygin, "On the Theory of Nonstationary Solidification in the Presence of a Mushy Zone," *Rasplavy* **5**, 69–76 (2008).
28. D. V. Alexandrov, A. A. Ivanov, and A. P. Malygin, "Self-Similar Solidification with a Two-Phase Zone from a Cooled Wall," *Vestn. Udmurt. Univ.* **1**, 14–25 (2008).
29. D. V. Alexandrov, A. A. Ivanov, and A. P. Malygin, "Self-Similar Solidification of Binary Alloys," *Acta Physica Polonica A* **115**, 795–799 (2009).
30. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Dynamic Stability Analysis of the Solidification of Binary Melts in the Presence of a Mushy Region: Changeover of Instability," *J. Cryst. Growth* **210**, 797–810 (2000).
31. R. N. Hills, D. E. Loper, and P. H. Roberts, "A Thermodynamic Consistent Model of a Mushy Zone," *Q. J. Mech. Appl. Math.* **36**, 505–539 (1983).
32. V. T. Borisov, "Theory of the Two-Phase Zone of a Metallic Ingot" (Metallurgiya, Moscow, 1987).
33. D. V. Alexandrov, "Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Zone: Exact Analytical Solution," *Int. J. Fluid. Mech. Res.* **27** (2–4), 213–222 (2000).
34. D. V. Alexandrov, "On the Theory of Solidification with a Quasiu-Equilibrium Two-Phase Zone," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **375** (2), 172–176 (2000).
35. D. V. Alexandrov, "Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Zone: Exact Analytical Solution of Nonlinear Model," *J. Cryst. Growth* **222**, 816–821 (2001).
36. D. V. Alexandrov and D. L. Aseev, "One-Dimensional Solidification of an Alloy with a Mushy Zone: Thermodiffusion and Temperature-Dependent Diffusivity," *J. Fluid. Mech.* **527**, 57–66 (2005).
37. D. V. Alexandrov and D. L. Aseev, "Directional Solidification with a Two-Phase Zone: Thermodiffusion and Temperature-Dependent Diffusivity," *Comp. Mater. Soc.* **37**, 1–6 (2006).
38. D. L. Aseev and D. V. Alexandrov, "Unidirectional Solidification with a Mushy Layer. The Influence of Weak Convection," *Acta Mater.* **54**, 2401–2406 (2006).
39. D. V. Alexandrov and A. P. Malygin, "Analytical Description of the Crystallography of Sea Water in Ice Cracks and Their Effect on the Ocean–Atmosphere Heat Exchange," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **411** (3), 390–394 (2006).
40. D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, I. G. Nizovtseva, et al., "Nonlinear Dynamics of Directional Solidification with a Mushy Layer. Analytic Solutions of the Problem," *Int. J. Heat Mass Transfer* **50**, 3616–3623 (2007).
41. D. V. Alexandrov, I. G. Nizovtseva, A. P. Malygin, et al., "Unidirectional Solidification of Binary Melts from a Cooled Boundary: Analytical Solutions of a Nonlinear Diffusion-Limited Problem," *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 114105–01–06 (2008).
42. D. V. Alexandrov, I. G. Nizovtseva, D. Lee, and H.-N. Huang, "Solidification from a Cooled Boundary with a Mushy Layer under Conditions of Nonturbulent and Turbulent Heat and Mass Transfer in the Ocean," *Int. J. Fluid Mech. Research* **37**, 1–14 (2010).
43. D. V. Alexandrov and I. G. Nizovtseva, "Nonlinear Dynamics of the False Bottom during the Solidification of Sea Water," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **419**, 262–265 (2008).
44. D. V. Alexandrov and I. G. Nizovtseva, "To the Theory of Underwater Ice Evolution, or Nonlinear Dynamics of "False Bottoms," *Int. J. Heat Mass Transfer* **51**, 5204–5208 (2008).
45. E. Scheil, "Bemerkungen zur Schichtkristallbildung," *Zeitschrift für Metallkunde* **34**, 70–72 (1942).
46. R. C. Kerr, A. W. Woods, M. G. Worster, and H. E. Huppert, "Solidification of an Alloy Cooled from above. Part 1. Equilibrium Growth," *J. Fluid Mech.* **216**, 323–342 (1990).
47. A. Aitta, H. E. Huppert, and M. G. Worster, "Diffusion-Controlled Solidification of a Ternary Melt from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.* **432**, 201–217 (2001).
48. D. M. Anderson, "A Model for Diffusion-Controlled Solidification of Ternary Alloys in Mushy Layers," *J. Fluid Mech.* **483**, 165–197 (2003).
49. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "The Stefan Problem of Solidification of Ternary Systems in the Presence of Moving Phase Transition Regions," *J. Exp. Theor. Phys.* **135** (5) 922–930 (2009).
50. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Analytical Solution for a Problem of Directional Solidification in Ternary System," *Acta Physica Polonica A* **115**, 786–790 (2009).
51. D. V. Alexandrov, "Nonlinear Dynamics of Solidification of Three-Component Systems," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **422** (3), 322–326 (2008).

52. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Nonlinear Dynamics of Directional Solidification of Ternary Solutions with Mushy Layers," *Heat Mass Transfer* **45**, 1467–1472 (2009).
53. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Solidification of a Ternary Melt from a Cooled Boundary, or Nonlinear Dynamics of Mushy Layers," *International Journal of Heat and Mass Transfer* **52**, 4807–4811 (2009).
54. B. A. Buffett, "Earth's Core and the Geodynamo," *Science* **288**, 2007–2012 (2007).
55. S. Fedotov, I. Bashkirtseva, and L. Ryashko, "Stochastic Dynamo Model for Subcritical Transition," *Phys. Rev. E* **73**, 066307–066311 (2006).
56. S. Fedotov, I. Bashkirtseva, and L. Ryashko, "Stochastic Analysis of Subcritical Amplification of Magnetic Energy in a Turbulent Dynamo," *Physica A* **342**, 491–506 (2004).
57. D. V. Alexandrov and V. V. Mansurov, "Dynamic Instability of the Quasi-Stationary Solidification of a Binary Melt in the Presence of a Narrow Quasi-Equilibrium Mushy Zone," *Kristallografiya* **41** (2), 376–378 (1996).
58. D. V. Alexandrov and V. V. Mansurov, "Dynamic Stability of a Solidification Process of a Binary Melt in the Presence of a Broad Quasiequilibrium Mushy Region," *Scripta Materialia* **35**, 787–790 (1996).
59. D. V. Alexandrov and V. V. Mansurov, "Dynamic Instability of the Quasi-Stationary Solidification of a Binary Melt in the Presence of a Broad Quasi-Equilibrium Mushy Zone," *Kristallografiya* **42** (3), 402–404 (1997).
60. D. V. Alexandrov, "Linear Analysis of Dynamic Instability of Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Zone," *Int. J. Fluid Mech. Research* **27** (2–4), 239–247 (2000).

Физика конденсированного состояния вещества

УДК 536.421.4

*Д.В. Александров, А.О. Иванов, А.П. Малыгин, И.В. Александрова, В.С. Нусилов***МАСШТАБНО-ИНВАРИАНТНЫЕ СВОЙСТВА ДВУХФАЗНОЙ ОБЛАСТИ
КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯ**

Исследованы самоподобные свойства двухфазной зоны концентрационного переохлаждения в стационарных и нестационарных условиях направленной кристаллизации бинарных расплавов.

Ключевые слова: затвердевание, задача Стефана, двухфазная зона.

Большое число физических, механических и химических процессов, связанных с фазовыми или химическими превращениями, традиционно описываются на основе классической фронтальной модели Стефана [1; 2]. Примерами могут служить: испарение жидкостей [3-5], рост новой фазы в метастабильной среде [6-8], фронтальное горение или фронтальные химические реакции [9], фильтрационное вытеснение вязких жидкостей в пористых веществах [10], рост изолированных дендритов [11; 12] и другие. Во многих случаях локально-плоская форма фронта, разделяющего две фазы, нарушается с образованием переходной области, содержащей элементы обеих фаз (см., например, [13-15]). В этой двухфазной области граница раздела часто представляет собой сильно разветвленную структуру, обладающую свойствами масштабного-временного самоподобия [16; 17]. Известными проявлениями являются растущие дендриты, облака, фрактальные кластеры, гидродинамические вязкие «пальцы» в пористых средах, химические реакции в турбулентных потоках. Указанные объекты представляют собой природные примеры так называемых фрактальных образований [18; 19], самоподобие и масштабное-временное инвариантность которых описываются скейлингово-степенной зависимостью с дробным показателем степени, именуемым фрактальной размерностью.

Среди многих явлений фазовых превращений важную прикладную роль играют процессы направленной кристаллизации многокомпонентных расплавов и растворов, используемые для получения чистых кристаллов или сплавов с заданными свойствами [13]. В затвердевающем расплаве часто происходит интенсивное выделение примеси из объема кристалла. Если это сопровождается сильной зависимостью температуры фазового перехода кристаллизующейся жидкости от концентрации примеси, то перед фронтом затвердевания возникает метастабильная область, называемая зоной концентрационного (диффузионного или конституционного) переохлаждения [20; 21]. В этой области реальная температура многокомпонентного расплава оказывается ниже его температуры затвердевания за счет чего складываются благоприятные условия для возникновения элементов новой фазы в виде дендритов, кристаллитов и прочего. В результате чисто твердая и чисто жидкая фазы разделяются переходной областью – двухфазной зоной [22-24].

Естественно, что присутствие двухфазной зоны кардинально меняет картину процесса, в связи с чем это явление активно исследуется. Однако гипотеза о возможной фрактально-самоподобной структуре двухфазной зоны до сих пор изучена слабо. К немногочисленным исследованиям в данной области можно отнести работу [25], в которой с помощью эвристически введенного скейлингового распределения плотности в двухфазной зоне было изучено влияние фрактальной размерности на параметры автомоделного режима затвердевания. Имеются также работы [26-28], показывающие, что внутри двухфазной зоны рост твердой фазы может приводить к формированию кластерных и дендритных структур, обладающих фрактальной природой. Учитывая сказанное, будем описывать двухфазную область с помощью пространственно-временных скейлинговых зависимостей.

Излагаемый материал частично основывается на полученных ранее точных аналитических решениях модели квазиравновесной двухфазной зоны (где переохлаждение практически полностью снимается за счет интенсивного тепловыделения растущими элементами твердой фазы), найденных в работах [29-36]. Ниже продемонстрировано, что распределения примеси и доли твердой фазы в квазиравновесной и неравновесной двухфазной зоне описываются скейлингово-степенными пространственными зависимостями с дробным показателем степени. Эта скейлинговая размерность зависит от

теплофизических свойств расплава и инвариантна относительно операционных параметров, управляющих процессом затвердевания. Другими словами, этот показатель представляет собой универсальную для каждого расплава характеристику.

В работе [32] показано, что протяженность двухфазной зоны, равно как и доля твердой фазы или концентрация примеси в ней, претерпевают самоподобное изменение при варьировании операционных параметров процесса, управляющих затвердеванием температурных градиентов. Такое поведение неизвестных функций наталкивает на мысль о фрактальной структуре зоны концентрационного переохлаждения. Хорошо известно, что многие фракталоподобные объекты, встречающиеся в природе, могут быть описаны с помощью масштабно-инвариантных фракталов (см., напр., [16-19]). В связи с этим попытаемся подойти к изучению двухфазной зоны с помощью введения определенных степенных зависимостей. Будем описывать распределение доли твердой фазы и концентрации примеси в двухфазной зоне с помощью однородных самоподобных функций

$$\varphi(y) = \varphi_* y^D, \quad y = 1 - \frac{x}{\varepsilon_m}, \quad (1)$$

$$\sigma_m(y) = \sigma_{\varepsilon_m} + (\sigma_* - \sigma_{\varepsilon_m}) y^D, \quad (2)$$

удовлетворяющих скейлинговым соотношениям

$$\varphi(\lambda y) = \lambda^D \varphi(y), \quad \sigma_m(\lambda y) - \sigma_{\varepsilon_m} = \lambda^D (\sigma_m(y) - \sigma_{\varepsilon_m}).$$

Здесь λ – константа, σ_* – концентрация примеси на границе твердая фаза – двухфазная зона, σ_{ε_m} – концентрация примеси на границе двухфазная зона – расплав, ε_m – протяженность двухфазной зоны. Скейлинговый параметр D , являющийся показателем степени в пространственных распределениях (1) и (2), играет роль размерности фрактальных объектов [16]. Если фракталоподобные пространственные зависимости (1) и (2) будут хорошо аппроксимировать точные аналитические решения модели квазиравновесной двухфазной зоны [29-32], это будет свидетельствовать о скейлинговой структуре области фазового перехода. Как легко заметить, σ_{ε_m} в уравнении (2) представляет собой нефрактальный участок функции $\sigma_m(x)$. Другими словами, распределение примеси $\sigma_m(x)$ вблизи границы двухфазная зона – расплав не является фрактальным, поскольку вытеснения примеси в расплав на этой границе практически не происходит.

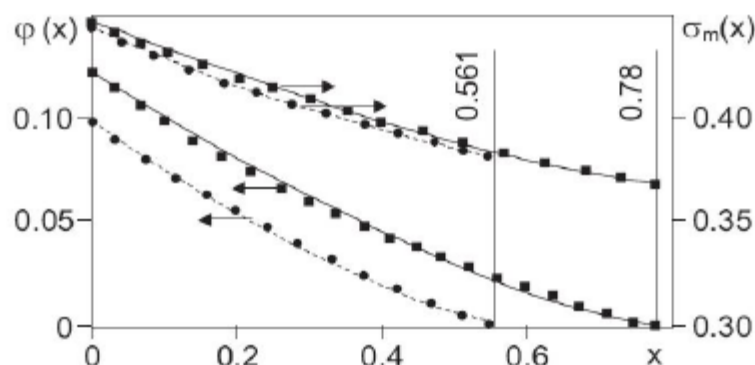


Рис. 1. Доля твердой фазы $\varphi(x)$ и концентрация примеси $\sigma_m(x)$ для сплава $Fe-Ni$ в соответствии с решениями работы [32] при температурных градиентах в расплаве $g_l = 20^\circ \text{C/см}$ и твердой фазе $g_s = 120^\circ \text{C/см}$ (кривые, отмеченные символом «черный квадрат», $\phi_* = 0,123$). Кривые, отмеченные символом «черный круг», построены при $g_s = 100^\circ \text{C/см}$ и $\phi_* = 0,097$. Сплошные и пунктирные линии показывают зависимости в соответствии со скейлинговыми распределениями (1) и (2). Вертикальными линиями отмечено положение безразмерной протяженности ε_m двухфазной зоны

На рис. 1 представлено сравнение точного решения модели из работы [32] и степенных зависимостей (1) и (2) для железо-никелевого сплава. Хорошее совпадение степенных зависимостей с аналитическим решением подтверждает гипотезу о скейлинговой структуре двухфазной зоны на всем ее протяжении. Следует подчеркнуть, что в соответствии с выражениями (1) и (2) доля и концентрация примеси внутри зоны определяются только своими значениями на ее границах и не зависят от скейлингового параметра, который составляет $D = 1.37 \pm 0.05$ для всех кривых на рис. 1. Небольшие изменения коэффициента распределения примеси приводят к сильному изменению параметра скейлинга D .

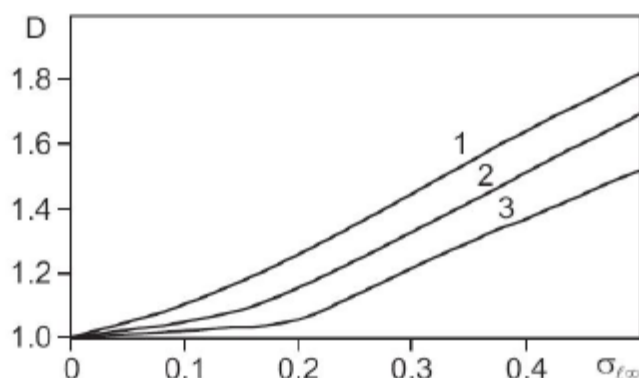


Рис. 2. Зависимость скейлингового показателя D от концентрации σ_{∞} примеси в расплаве вдали от двухфазной зоны при различных значениях коэффициента распределения примеси $k = 0,63$ (1), $0,68$ (2), $0,73$ (3)

На рис. 2 показана зависимость коэффициента D от исходной концентрации примеси в расплаве σ_{∞} для различных значений равновесного коэффициента распределения k . При увеличении этой концентрации зависимость становится почти линейной, в то время как при уменьшении σ_{∞} появляется нелинейность, связанная со свойством $D \rightarrow 1$ при малых значениях σ_{∞} . Последнее можно продемонстрировать с помощью асимптотических разложений интегральных соотношений по малым значениям φ , ($0 \leq \varphi \leq \varphi_*$, $\ll 1$). Используя следующие аппроксимации при $\varphi_* \rightarrow 0$ (обозначения соответствуют работе [32]):

$$D_0(\varphi) \sim 1, h(\varphi) \sim 1, \Lambda_m(\varphi) \sim \Lambda_1, 1 - \varphi \gg M_2(\varphi), M_1(\varphi) \sim G_\ell(\varphi - 1),$$

$$B_1 \sim -p_0 - N_1 \Lambda_1 G_\ell,$$

из точных аналитических решений уравнений квазиравновесной двухфазной зоны, затвердевающей с постоянной скоростью, получим (см. работу [32]):

$$\sigma_m(\varphi) \approx \sigma_{\infty} \left[1 + G_\ell + \frac{G_\ell}{1-k} \left((1-\varphi)^{1-k} - 1 \right) \right] (1-\varphi)^{k-1}, \quad (3)$$

$$1 - \frac{\chi}{\varepsilon_m} \approx \frac{1}{G_\ell \sigma_{\infty} \varepsilon_m} (\sigma_m(\varphi) - \sigma_m(0)), \quad (4)$$

$$\varepsilon_m \approx \frac{1}{G_\ell \sigma_{\infty}} [\sigma_m(\varphi_*) - \sigma_m(0)]. \quad (5)$$

Раскладывая соотношение (3) в ряд по доле твердой фазы φ в двухфазной зоне, будем иметь:

$$\sigma_m(\varphi) \approx \sigma_{\infty} \left[1 + G_\ell + \left(1 + G_\ell - \frac{G_\ell}{1-k} \right) (1-k)\varphi \right]. \quad (6)$$

Далее, комбинируя соотношения (4)-(6), получим:

$$\frac{1}{\varepsilon_m G_\ell} \left(1 + G_\ell - \frac{G_\ell}{1-k} \right) (1-k) \varphi \approx 1 - \frac{\chi}{\varepsilon_m}, \quad \frac{1}{\varepsilon G_\ell} \left(1 + G_\ell - \frac{G_\ell}{1-k} \right) (1-k) \approx \frac{1}{\varphi_*}.$$

Из двух последних выражений следует, что

$$\varphi \approx \varphi_* \left(1 - \frac{\chi}{\varepsilon_m} \right), \quad \varphi_* \rightarrow 0. \quad (7)$$

Теперь приближенному выражению (6) можно придать вид

$$\sigma_m(\varphi) \approx \sigma_{\ell\infty} \left[1 + G_\ell + \varepsilon_m G_\ell \frac{\varphi}{\varphi_*} \right]. \quad (8)$$

Принимая во внимание, что

$$\sigma_m(0) \equiv \sigma_{\varepsilon_m} \approx \sigma_{\ell\infty} (1 + G_\ell), \quad \sigma_m(\varphi_*) \equiv \sigma_* \approx \sigma_{\ell\infty} [1 + G_\ell + \varepsilon_m G_\ell],$$

из соотношения (8) получим

$$\sigma_m(\varphi) \approx \sigma_{\varepsilon_m} + (\sigma_* - \sigma_{\varepsilon_m}) \frac{\varphi}{\varphi_*} = \sigma_{\varepsilon_m} + (\sigma_* - \sigma_{\varepsilon_m}) \left(1 - \frac{\chi}{\varepsilon_m} \right). \quad (9)$$

Далее, сравнивая выражения (1), (2) и (7), (9), легко увидеть, что в предельном случае $\varphi_* \ll 1$ коэффициент подобия $D \rightarrow 1$. Из рис. 3, где отображена зависимость доли твердой фазы на границе твердая фаза – двухфазная зона от концентрации примеси на бесконечности для железо-никелевого сплава, видно, что справедливо неравенство $\varphi_* \ll 1$ при малых $\sigma_{\ell\infty}$. Поэтому стремление скейлингового коэффициента к единице при малых исходных концентрациях примеси можно считать модельно обоснованным.

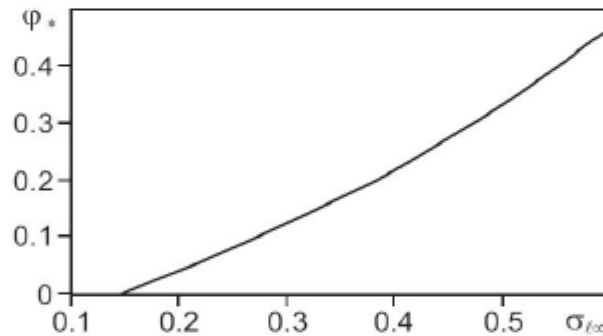


Рис. 3. Зависимость доли φ_* твердой фазы от концентрации $\sigma_{\ell\infty}$ примеси в расплаве вдали от двухфазной зоны, $k = 0,68$

Общим выводом из анализа рис. 1-3 является совпадение универсальных скейлинговых зависимостей (1) и (2) с точными аналитическими решениями уравнений квазиравновесной двухфазной зоны, (движущейся в расплав с постоянной скоростью) при дробных значениях показателя D , отличающихся от размерности пространства. Таким образом, этот результат позволяет трактовать квазиравновесную двухфазную зону в рамках рассмотренного квазистационарного режима затвердевания как фракталоподобный объект. Поскольку рассмотренный квазистационарный режим может реализовываться вдали от существенно нестационарных начальной и конечной стадий процесса, возникает естественный вопрос о скейлинговых свойствах двухфазной зоны для таких ситуаций. Рассмотрению этого вопроса посвящено дальнейшее изложение материала.

В качестве первого нестационарного режима рассмотрим автомодельный процесс затвердевания, формирующийся на достаточно больших временах от начала процесса. Автомодельное затвердевание описывается одной пространственно-временной переменной, пропорциональной ξ/\sqrt{t} (здесь

ξ и τ размерные пространственная координата и время). Известно большое количество работ, посвященных исследованию автомодельных режимов кристаллизации и плавления. Так, например, в работах [37-41] был исследован такой режим затвердевания с плоским фронтом и двухфазной зоной, в работах [1; 42-46] – затвердевание многокомпонентных расплавов, а в работе [47] – режим плавления. Однако вопрос о возможных фракталоподобных свойствах примесного распределения, возникающих в автомодельных процессах, ранее не изучался. Далее займемся исследованием таких свойств для автомодельной кристаллизации в присутствии квазиравновесной двухфазной зоны.

Двухфазная зона в автомодельном процессе кристаллизации зарождается благодаря образованию перед плоским фронтом затвердевания концентрационного переохлаждения [24; 48; 49]. Процесс замерзания после возникновения такого переохлаждения должен описываться на основе одной из моделей двухфазной зоны концентрационного переохлаждения. Будем считать, что твердая фаза располагается в области $0 < \xi < \Sigma_s(\tau)$, жидкая – в области $\Sigma_\ell(\tau) < \xi < \infty$, а пространство $\Sigma_s(\tau) < \xi < \Sigma_\ell(\tau)$ заполнено двухфазной средой.

Введем автомодельные переменные η , λ_α и λ_β :

$$\eta = \frac{\xi}{2\sqrt{D_\ell\tau}}, \quad \lambda_\alpha = \frac{\Sigma_\ell(\tau)}{2\sqrt{D_\ell\tau}}, \quad \lambda_\beta = \frac{\Sigma_s(\tau)}{2\sqrt{D_\ell\tau}}. \quad (10)$$

При этом переменные λ_α и λ_β зависят от теплофизических и операционных параметров системы и определяются из решения задачи.

Запишем модель работы [32] в автомодельных переменных (10), учитывая, что все неизвестные функции зависят только от единственной пространственно-временной переменной η . Исключая температуру с помощью уравнения ликвидус, получим следующие выражения (обозначения соответствуют работе [32]):

$$\eta \frac{d}{d\eta} [h(\varphi)(p_0 - q_m)] = \frac{N_1}{2} \frac{d}{d\eta} \left[\Lambda_m(\varphi) \frac{dq_m}{d\eta} \right] + N_2 \eta \frac{d\varphi}{d\eta}, \quad \lambda_\alpha < \eta < \lambda_\beta, \quad (11)$$

$$-\eta \frac{d}{d\eta} [(1-\varphi)q_m] = \frac{1}{2} \frac{d}{d\eta} \left[D_0(\varphi) \frac{dq_m}{d\eta} \right] + kq_m \eta \frac{d\varphi}{d\eta}, \quad \lambda_\alpha < \eta < \lambda_\beta, \quad (12)$$

где

$$p_0 = \frac{\theta_*}{m\sigma_{\ell\infty}}, \quad h(\varphi) = \frac{\rho_m(\varphi)C_m(\varphi)}{\rho_\ell C_\ell}, \quad N_1 = \frac{\lambda_s}{D_\ell \rho_\ell C_\ell}, \quad N_2 = \frac{L_V}{\rho_\ell C_\ell m\sigma_{\ell\infty}}.$$

Пограничные условия на границах твердая фаза – двухфазная область (λ_β) и двухфазная область – расплав (λ_α) в переменных (10) принимают вид:

$$\varphi = 0, \quad \eta = \lambda_\alpha, \quad (13)$$

$$p_0 - q_m = p_\ell, \quad \eta = \lambda_\alpha, \quad (14)$$

$$q_m = q_\ell, \quad \eta = \lambda_\alpha, \quad (15)$$

$$-\frac{dq_m}{d\eta} = \frac{dp_\ell}{d\eta}, \quad \eta = \lambda_\alpha, \quad (16)$$

$$\frac{dq_m}{d\eta} = \frac{dq_\ell}{d\eta}, \quad \eta = \lambda_\alpha, \quad (17)$$

$$\varphi = \varphi_*, \quad \eta = \lambda_\beta, \quad (18)$$

$$p_s = p_0 - q_m, \quad \eta = \lambda_\beta, \quad (19)$$

$$\frac{dp_s}{d\eta} + \Lambda_m(\varphi_*) \frac{dq_m}{d\eta} \frac{2}{P_1} (1-\varphi_*) \lambda_\beta, \quad \eta = \lambda_\beta, \quad (20)$$

$$\frac{dq_m}{d\eta} + 2(1-k)\lambda_\beta q_m = 0, \quad \eta = \lambda_\beta, \quad (21)$$

$$q_s = kq_m, \quad \eta = \lambda_\beta. \quad (22)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$p_\ell = \frac{\theta_\ell}{m\sigma_{\ell\infty}}, \quad p_s = \frac{\theta_s}{m\sigma_{s\infty}}, \quad q_s = \frac{\sigma_s}{\sigma_{s\infty}}, \quad (23)$$

а также учтено, что $\lambda_m = \lambda_\ell$ при $\varphi = 0$ и $D_m = D_\ell$ при $\varphi = 0$.

В чисто жидкой и чисто твердой фазах выполняются уравнения теплопроводности и диффузии примеси. Записывая эти уравнения для процесса направленного затвердевания вдоль оси ξ в переменных (10) с учетом соотношений (23), получим

$$\frac{d^2 p_\ell}{d\eta^2} = -2 \frac{D_\ell}{a_\ell} \eta \frac{dp_\ell}{d\eta}, \quad \frac{d^2 q_\ell}{d\eta^2} = -2 \eta \frac{dq_\ell}{d\eta}, \quad \lambda_\beta < \eta < \infty, \quad (24)$$

$$\frac{d^2 p_s}{d\eta^2} = -2 \frac{D_s}{a_s} \eta \frac{dp_s}{d\eta}, \quad \frac{d^2 q_s}{d\eta^2} = -2 \frac{D_s}{D_s} \eta \frac{dq_s}{d\eta}, \quad 0 < \eta < \lambda_\alpha. \quad (25)$$

Уравнения (24) и (25) должны удовлетворять пограничным условиям, записанным вдали от двухфазной зоны. Эти граничные условия в безразмерных переменных (23) принимают вид:

$$p_\ell \rightarrow p_{\ell\infty}, \quad q_\ell \rightarrow 1, \quad \eta \rightarrow \infty, \quad (26)$$

$$p_s = p_w, \quad q_s = q_w, \quad \eta = 0, \quad (27)$$

где введены обозначения

$$p_{\ell\infty} = \frac{\theta_{\ell\infty}}{m\sigma_{\ell\infty}}, \quad p_w = \frac{\theta_w}{m\sigma_{\ell\infty}}.$$

Решения уравнений (24) и (25), удовлетворяющие граничным условиям (26) и (27), имеют вид:

$$p_\ell(\eta) = p_{\ell\infty} + (p_{\ell\beta} - p_{\ell\infty}) \frac{\operatorname{erfc}(\eta\sqrt{D_\ell/a_\ell})}{\operatorname{erfc}(\lambda_\beta\sqrt{D_\ell/a_\ell})}, \quad \lambda_\beta < \eta < \infty, \quad (28)$$

$$q_\ell(\eta) = 1 + (q_{\ell\beta} - 1) \frac{\operatorname{erfc}(\eta)}{\operatorname{erfc}(\lambda_\beta)}, \quad \lambda_\beta < \eta < \infty, \quad (29)$$

$$p_s(\eta) = p_w + (p_{s\alpha} - p_w) \frac{\operatorname{erf}(\eta\sqrt{D_s/a_s})}{\operatorname{erf}(\lambda_\alpha\sqrt{D_s/a_s})}, \quad 0 < \eta < \lambda_\alpha, \quad (30)$$

$$q_s(\eta) = q_w + (q_{s\alpha} - q_w) \frac{\operatorname{erf}(\eta\sqrt{D_s/D_s})}{\operatorname{erf}(\lambda_\alpha\sqrt{D_s/D_s})}, \quad 0 < \eta < \lambda_\alpha, \quad (31)$$

где $p_{\ell\beta}$, $q_{\ell\beta}$ и $p_{s\alpha}$, $q_{s\alpha}$ представляют собой значения распределений (28)-(31) соответственно на границах $\eta = \lambda_\beta$ и $\eta = \lambda_\alpha$. Эти значения находятся из граничных условий (13)-(22) путем стыковки решений (28)-(31) с решением уравнений (11) и (12).

Система уравнений (11), (12) с граничными условиями (13)-(22) была решена численно в работах [37; 50] для двух систем, теплофизические характеристики которых приведены в таблице.

На рис. 4 и 5 показаны зависимости «констант параболического роста» от температуры θ_1 (θ_w – температура границы охлаждения). Зависимость $\lambda_1(\theta_1)$ построена для кристаллизации расплава с плоским фронтом. Сплошные кривые соответствуют численным решениям, найденным в работах [37; 50], а «крестиками» на рис. 5 показаны экспериментальные точки, согласно работам [37; 51]. Из рис. 4 и 5 видно, что имеется точка А бифуркации решений (точка пересечения кривых), которая определяется из условия появления концентрационного переохлаждения и описывает переход от автомодельного фронтального режима кристаллизации к автомодельному режиму кристаллизации с двух-

двухфазной зоной. Значения констант параболического роста в точке A составляют $\lambda_\beta = \lambda_\alpha = \lambda_1 = \lambda_{1A} \approx 0,15$, $\theta_{1\beta} = \theta_{1\alpha} = \theta_{1A} \approx 2^\circ \text{C}$ (рис. 4) и $\lambda_\beta = \lambda_\alpha = \lambda_1 = \lambda_{1A} \approx 0,1537$, $\theta_{1\beta} = \theta_{1\alpha} = \theta_{1A} \approx 1,77^\circ \text{C}$ (рис. 5).

Теплофизические свойства расчетных систем [37]

Характеристика	Величина, система I	Величина, система II: $\text{NaNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$	Единицы измерения
Коэффициент распределения примеси, k	0	0	–
Коэффициент наклона линии ликвидус, m	0,4	0,4	$^\circ \text{C}$
Скрытая теплота затвердевания, L_U	80	73,6	кал/см^3
Коэффициент диффузии примеси в жидкой фазе, D_ℓ	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$\text{см}^2/\text{с}$
Коэффициент диффузии примеси в твердой фазе, D_s	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$\text{см}^2/\text{с}$
Коэффициент теплопроводности в жидкой фазе, λ_ℓ	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$\text{кал/с} \cdot \text{см} \cdot ^\circ \text{C}$
Коэффициент теплопроводности в твердой фазе, λ_s	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$5,3 \cdot 10^{-3}$	$\text{кал/с} \cdot \text{см} \cdot ^\circ \text{C}$
Коэффициент температуропроводности в жидкой фазе, a_ℓ	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$\text{см}^2/\text{с}$
Коэффициент температуропроводности в твердой фазе, a_s	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-2}$	$\text{см}^2/\text{с}$
Плотность жидкой фазы, ρ_ℓ	1,0	1,0	г/см^3
Плотность твердой фазы, ρ_s	1,0	0,48	г/см^3
Концентрация примеси в расплаве вдали от двухфазной зоны, $\sigma_{\ell\infty}$	14	14	–
Температура в расплаве вдали от двухфазной зоны, $\theta_{\ell\infty}$	15	15	$^\circ \text{C}$

Другими словами, развитая теория позволяет рассчитать точку A «со стороны двухфазной зоны» (решение модели кристаллизации с двухфазной зоной), в отличие от теории работы [37], где точка A находится из условия возникновения концентрационного переохлаждения «со стороны фронта» (решение модели кристаллизации с плоским фронтом).

Можно заметить, что функция $\lambda_\beta(\theta_1)$ ведет себя подобно функции корня, то есть:

$$\lambda_\beta \approx \lambda_{1A} + \sqrt{A(\theta_1 - \theta_{1A})}.$$

Эта точка, как видно из графиков, ответственна за появление двухфазной зоны. Зависимости, построенные в соответствии с этим выражением, показаны на рис. 4 и 5 штриховыми кривыми. Константа A по порядку величины составляет 0,75 (рис. 4) и 2 (рис. 5).

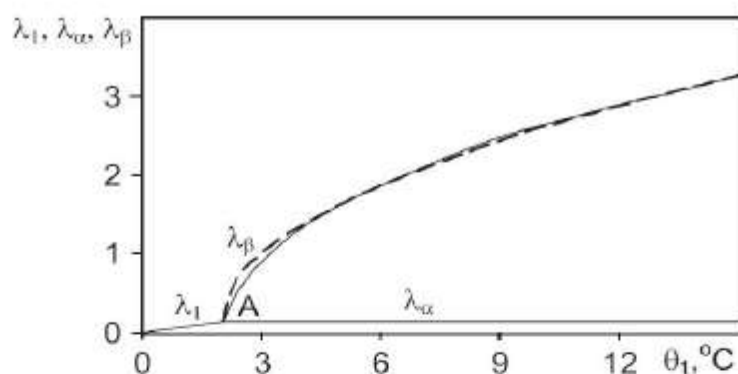


Рис. 4. Зависимости λ_1 , λ_α и λ_β от температуры $\theta_1 = \theta_s - m\sigma_{\ell\infty} - \theta_W$ для системы I (табл.)

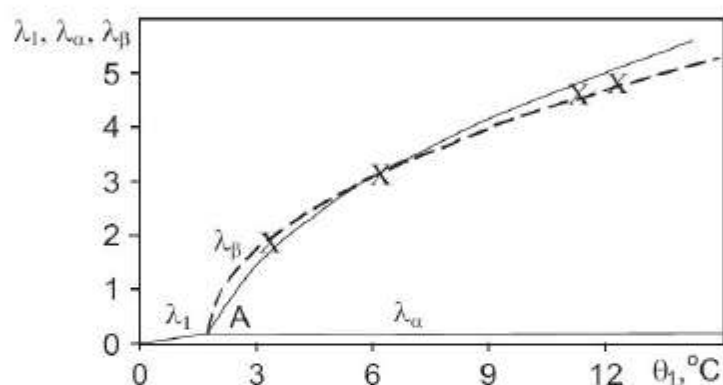


Рис. 5. Зависимости λ_1 , λ_α и λ_β от температуры $\theta_1 = \theta_s - m\sigma_{\ell\infty} - \theta_W$ для системы II (табл.)

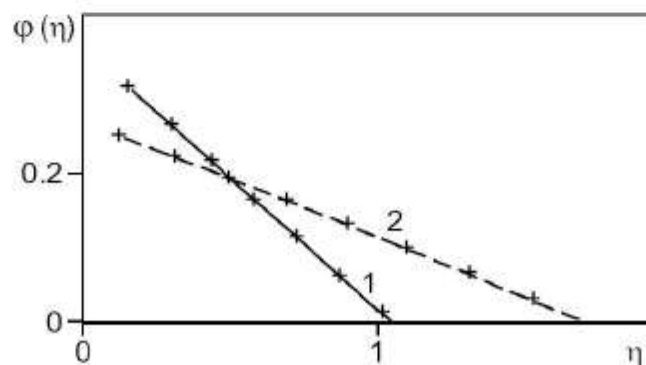


Рис. 6. Доля твердой фазы как функция пространственной координаты в двухфазной зоне. Цифры 1 и 2 у кривых соответствуют системам I и II из таблицы ((1): $\lambda_\alpha = 0,154$, $\lambda_\beta = 1,05$, $\phi = 0,328$, $D = 1,03$; (2): $\lambda_\alpha = 0,154$, $\lambda_\beta = 1,74$, $\phi = 0,239$, $D = 1,07$)

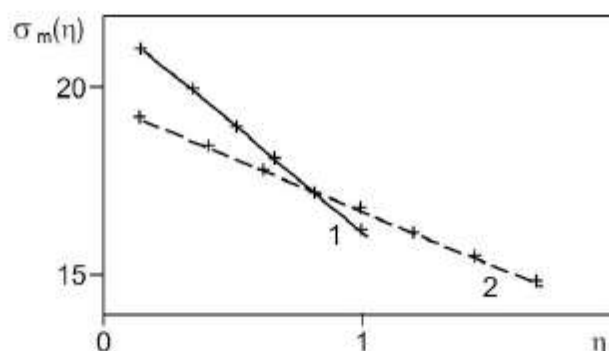


Рис. 7. Концентрация примеси как функция пространственной координаты в двухфазной зоне. Цифры 1 и 2 у кривых соответствуют системам I и II из табл. 1 ((1): $\lambda_a = 0,154$, $\lambda_p = 1,05$, $\sigma_* = 20,952$, $D = 1,03$; (2): $\lambda_a = 0,154$, $\lambda_p = 1,74$, $\sigma_* = 19,281$, $D = 1,07$)

На рис. 6 и 7 построено решение модели (11)-(22), (28)-(31) в плоскостях (φ, η) и (σ_m, η) (сплошные кривые), а также для сравнения приведено решение согласно степенным самоподобным распределениям (1) и (2) (эти решения проиллюстрированы символами «+»). Как легко заметить, степенные распределения (1) и (2) достаточно хорошо ложатся на численное решение задачи. Важно отметить то обстоятельство, что в случае фиксированных теплофизических и операционных параметров, построенные зависимости не зависят от масштабного параметра D , который составляет $1,03 \pm 0,05$ и $1,07 \pm 0,05$ для систем I и II соответственно. Таким образом, можно сделать вывод, что самоподобные распределения (1) и (2) хорошо описывают нестационарное затвердевание на его автомодельной стадии.

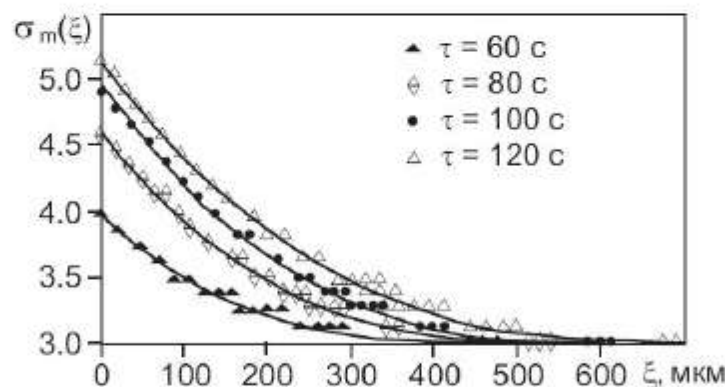


Рис. 8. Сравнение скейлингового закона (2) (сплошные кривые) с экспериментальными данными работ [52; 53] (соответствующие символы) на начальных стадиях процесса кристаллизации

Возникает естественный вопрос: сохраняется ли это свойство для других нестационарных режимов затвердевания. На рис. 8 приведена зависимость концентрации примеси перед границей твердая фаза – двухфазная зона ($\xi = 0$; здесь ξ и ε_m , согласно соотношениям (1) и (2), играют роль размерных переменных) для кристаллизующегося в нестационарных условиях водного раствора KCl по данным работ [52; 53] (в этих работах с помощью интерферометра Маха-Зендера исследовался процесс направленной кристаллизации от стенки). На временах $\tau > 60$ с. после начала процесса затвердевания перед плоским фронтом образуется концентрационное переохлаждение, приводящее к воз-

никновению метастабильной области – двухфазной зоны. Как видно из рис. 8, концентрационный профиль стремится к некоторому стационарному значению при увеличении времени кристаллизации (другими словами, с увеличением времени процесса расстояние между распределениями концентрации примеси убывает). Тем не менее, даже на начальных стадиях кристаллизации с неустановившимися характеристиками двухфазной зоны, соотношение (2) хорошо описывает экспериментальные кривые. Скейлинговый параметр для данной системы составляет величину $D = 2,70 \pm 0,05$ для всех кривых на рис. 8, экспериментально полученных авторами работ [52; 53] для различных моментов времени. Фактически продемонстрированные экспериментальные данные подтверждают гипотезу о фракталоподобной структуре двухфазной зоны на начальных этапах затвердевания с неизменным показателем D .

Итак, можно сделать вывод о том, что характеристики двухфазной зоны хорошо описываются скейлинговыми законами (1) и (2) на всех этапах ее движения (на начальной нестационарной стадии, на установившейся стадии кристаллизации с постоянной скоростью и на конечной нестационарной стадии, когда формируется автомодельный режим). Это позволяет существенно упростить математическое описание сильно нестационарных нелинейных процессов направленной кристаллизации [54-60].

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 09-08-00844, 10-03-00338, 11-01-00137) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 гг.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александров Д.В., Иванов А.А. Задача Стефана затвердевания трехкомпонентных систем при наличии движущихся областей фазового перехода // ЖЭТФ. 2009. Т. 135. С. 942-950.
2. Alexandrov D.V., Malygin A.P. The Stefan problem for unsteady-state evaporation of a volatile component in the solid-liquid-gas systems: exact analytical solution // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2010. Vol. 53. P. 2790-2794.
3. Александров Д.В. К теории процессов испарения в системе жидкость-кристалл // ЖЭТФ. 2009. Т. 136, вып. 3. С. 526-530.
4. Александров Д.В. Нелинейная динамика системы жидкость-кристалл при испарении летучего компонента // Доклады Академии наук. 2009. Т. 428, № 4. С. 465-468.
5. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Phase transitions in solid-liquid-gas systems with applications to alkali metal generators // Physica A. 2010. Vol. 389. P. 2063-2069.
6. Асеев Д.Л., Александров Д.В. Нелинейная динамика затвердевания бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной // Доклады Академии наук. 2006. Т. 408. С. 609-613.
7. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2006. Vol. 49. P. 4903-4909.
8. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы. 2011. № 1. С. 16-30.
9. Zel'dovich Ya., Istratov A.G., Kidin N.I., Librovich V.B. Flame propagation in tubes: hydrodynamics and stability // Combustion Science and Technology. 1980. Vol. 24. P. 1-13.
10. Pelce P. Dynamics of curved fronts. Boston: Academic Press, 1988.
11. Alexandrov D.V., Galenko P.K., Herlach D.M. Selection criterion for the growing dendritic tip in a non-isothermal binary system under forced convective flow // J. Crystal Growth. 2010. Vol. 312. P. 2122-2127.
12. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при вынужденном конвективном течении и кристаллизации бинарной жидкости // Вестн. Удм. ун-та. Сер. Физика и химия. 2010. Вып. 1. С. 3-16.
13. Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization. New York; Wallingford: Begell House, 2001. 183 p.
14. Александров Д.В., Мансуров В.В., Галенко П.К. Морфологическая устойчивость плоской границы раздела фаз бинарного расплава в процессах высокоскоростной кристаллизации // Доклады Академии наук. 1996. Т. 351, №1. С. 37-39.
15. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Coupled convective and morphological instability of the inner core boundary of the Earth // Physics of the Earth Planet. Int. 2011. Vol. 189. P. 134-141.
16. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
17. Falconer K.J. The geometry of fractal sets. Cambridge: Cambridge University Press, 1985.
18. Vicsek T. Fractal growth phenomena. Singapore: World Scientific, 1989.
19. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. М.: Наука, 1991.
20. Иванцов Г.П. Диффузионное переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава // ДАН СССР. 1951. Т. 81, № 2. С. 179-182.

21. Оно А. Затвердевание металлов. М.: Металлургия, 1980. 152 с.
22. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. М.: Металлургия, 1987. 224 с.
23. Александров Д.В. К теории зарождения двухфазной зоны концентрационного переохлаждения // Доклады Академии наук. 2003. Т. 392, № 3. С. 322-327.
24. Alexandrova I.V., Alexandrov D.V., Aseev D.L., Bulitcheva S.V. Mushy layer formation during solidification of binary alloys from a cooled wall: the role of boundary conditions // Acta Physica Polonica A. 2009. Vol. 115. P. 791-794.
25. Alexandrov D.V., Ivanov A.O., Komarovski M.E. An influence of a fractal-like mushy region on solidification process // Int. J. Fluid Mech. Res. 1999. Vol. 26, №2. P. 224-231.
26. Ihle T., Muller-Krumbhaar H. Diffusion-limited fractal growth morphology in thermodynamical two-phase systems // Phys. Rev. Lett. 1993. Vol. 70, №20. P. 3083-3086.
27. Ihle T., Muller-Krumbhaar H. Fractal and compact growth morphologies in phase transitions with diffusion transport // Phys. Rev. E. 1994. Vol. 49, № 4. P. 2972-2991.
28. Brener E., Muller-Krumbhaar H., Temkin D. Structure formation and the morphology diagram of possible structures in two-dimensional diffusional growth // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 54, № 3. P. 2714-2722.
29. Александров Д.В. К теории затвердевания с квазиравновесной двухфазной зоной // Доклады Академии наук. 2000. Т. 375. С. 172-176.
30. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy zone: exact analytical solution // Int. J. Fluid Mechanics Research. 2000. Vol. 27, №2-4. P. 213-222.
31. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: analytical solution of nonlinear model // J. Crystal Growth. 2001. Vol. 222. P. 816-821.
32. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium two-phase zone // Acta Materialia. 2001. Vol. 49. P. 759-764.
33. Alexandrov D.V., Aseev D.L. Solidification of an alloy with a mushy zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // J. Fluid Mechanics. 2005. Vol. 527. P. 57-66.
34. Alexandrov D.V., Aseev D.L. Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // Computational Materials Science. 2006. Vol. 37. P. 1-6.
35. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection // Acta Materialia. 2006. Vol. 54. P. 2401-2406.
36. Александров Д.В., Рахматуллина И.В., Малыгин А.П. К теории затвердевания с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения // Расплавы. 2010. № 4. С. 88-96.
37. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary // J. Fluid Mechanics. 1986. Vol. 167. P. 481-501.
38. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Self-similar solidification of an alloy from a cooled boundary // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2006. Vol. 49. P. 763-769.
39. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. Автомодельное затвердевание с двухфазной зоной от охлаждаемой стенки // Вестн. Удм. ун-та. Сер. Физика и химия. 2008. Вып. 1. С. 14-25.
40. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. К теории нестационарного затвердевания при наличии двухфазной зоны // Расплавы. 2008. № 5. С. 69-76.
41. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Malygin A.P. Self-similar solidification of binary alloys // Acta Physica Polonica A. 2009. Vol. 115. P. 795-799.
42. Voller V.R. A similarity solution for the solidification of a multicomponent alloy // Int. J. Heat and Mass Transfer. 1997. Vol. 40. P. 2869-2877.
43. Александров Д.В. Нелинейная динамика затвердевания трехкомпонентных систем // Доклады Академии наук. 2008. Т. 422. С. 322-326.
44. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Analytical solution for a problem of directional solidification in a ternary system // Acta Physica Polonica A. 2009. Vol. 115, № 4. P. 786-790.
45. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2009. Vol. 52. P. 4807-4811.
46. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers // Heat Mass Transfer. 2009. Vol. 45. P. 1467-1472.
47. Feltham D.L., Worster M.G. Similarity solutions describing the melting of a mushy layer // J. Crystal Growth. 2000. Vol. 208. P. 746-756.
48. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Emergence of a mushy region in processes of binary melt solidification // Int. J. Fluid Mechanics Research. 1999. Vol. 26, № 2. P. 248-264.
49. Alexandrov D.V. Incipience of a mushy zone in binary melt solidification processes // Int. J. Fluid Mechanics Research. 2000. Vol. 27, № 2-4. P. 223-238.
50. Alexandrov D.V., Bulitcheva S.V., Komarovski M.E., Malygin A.P. Fractal-like structures in the self-similar crystallization with a two-phase zone // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2003. Vol. 5, № 3. P. 595-600.
51. Huppert H.E., Worster M.G. Dynamic solidification of a binary melt // Nature. 1985. Vol. 314. P. 703-707.
52. Nagashima K., Furukawa Y. Time development of a solute diffusion field and morphological instability on a planar interface in the directional growth of ice crystals // J. Crystal Growth. 2000. Vol. 209. P. 167-174.
53. Nagashima K., Furukawa Y. Interferometric observation of the effects of gravity on the horizontal growth of ice

- crystals in a thin growth cell // *Physica D*. 2000. Vol. 147. P. 177-186.
54. Александров Д.В., Малыгин А.П. Аналитическое описание кристаллизации морской воды в трещинах льдов и их влияние на теплообмен между океаном и атмосферой // Доклады Академии наук. 2006. Т. 411. С. 390-394.
55. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Solidification of leads: approximate solutions of non-linear problem // *Annals of Glaciology*. 2006. Vol. 44. P. 118-122.
56. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G., Huang H.-N., Lee D. Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem // *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 2007. Vol. 50. P. 3616-3623.
57. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G., Huang H.-N., Lee D. Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2008. Vol. 20. P. 114105-01-114105-06.
58. Александров Д.В., Низовцева И.Г. Нелинейная динамика ложного дна при замерзании морской воды // Доклады Академии наук. 2008. Т. 419. С. 262-265.
59. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. To the theory of underwater ice evolution, or nonlinear dynamics of "false bottoms" // *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 2008. Vol. 51. P. 5204-5208.
60. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Lee D., Huang H.-N. Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean // *Int. J. Fluid Mechanics Research*. 2010. Vol. 37. P. 1-14.

Поступила в редакцию 22.12.11

D.V. Alexandrov, A.O. Ivanov, A.P. Malygin, I.V. Alexandrova, V.S. Nustrov
Scale-invariant properties of a two-phase domain of concentration supercooling

Self-similar properties of a two-phase zone of concentration supercooling are studied in the steady- and unsteady-state conditions of the directional crystallization of binary melts.

Keywords: solidification, Stefan problem, two-phase zone.

Александров Дмитрий Валерьевич,
доктор физико-математических наук, профессор
Иванов Алексей Олегович,
доктор физико-математических наук, профессор
Малыгин Алексей Павлович,
кандидат физико-математических наук, доцент
Александрова Ирина Владимировна,
стажер-исследователь
Нустров Вадим Степанович,
доктор физико-математических наук, профессор
ФГАОУ ВПО «УрФУ имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»
620083, Россия, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51
E-mail: Dmitri.Alexandrov@usu.ru

Alexandrov D.V., doctor of physics and mathematics,
professor
Ivanov A.O., doctor of physics and mathematics, professor
Malygin A.P., candidate of physics and mathematics,
associate professor
Alexandrova I.N., researcher
Nustrov V.S., doctor of physics and mathematics, professor
Ural Federal University
620083, Russia, Ekaterinburg, Lenina av., 51
E-mail: Dmitri.Alexandrov@usu.ru